



Etude et modélisation de l'effet thermocapillaire, application à la refusion des métaux réfractaires

Christophe Avare

► To cite this version:

Christophe Avare. Etude et modélisation de l'effet thermocapillaire, application à la refusion des métaux réfractaires. Electromagnétisme. INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE DE GRENOBLE, 1994. Français. <tel-01340162>

HAL Id: tel-01340162

<https://hal.archives-ouvertes.fr/tel-01340162>

Submitted on 30 Jun 2016

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

THESE

présentée par

Christophe AVARE

pour obtenir le titre de DOCTEUR

**de l'INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE DE
GRENOBLE**

(Arrêté ministériel du 30 mars 1992)

Spécialité : Mécanique

**Etude et modélisation de l'effet
thermocapillaire, application à la refusion
des métaux réfractaires**

Date de soutenance : 20 Octobre 1994

Composition du jury :

M.	F. Robert	Président
M.	D. Ablitzer	Rapporteur
M.	J. Ouazzani	Rapporteur
M.	B. Antoni	
M.	Y. Fautrelle	

Thèse préparée au sein du laboratoire EPM-MADYLAM

Ce travail a été réalisé au laboratoire EPM-MADYLAM de Grenoble actuellement dirigé par monsieur Marcel Garnier. Je le remercie pour la confiance qu'il m'a accordée en m'accueillant une première fois pour mon DEA, puis en mettant à ma disposition les moyens nécessaires à la concrétisation de ce travail.

Mes remerciements vont également à monsieur Yves Fautrelle, Professeur à l'ENSHMG (et maintenant Directeur de cet établissement) qui a dirigé mon travail en aiguillant mes idées vers les questions essentielles que seules une grande expérience de la recherche et une profonde compréhension de la mécanique des fluides permettent de saisir.

Je suis reconnaissant à monsieur François Robert, Professeur à l'IMAG, pour avoir présidé le jury de thèse et pour ses encouragements concernant l'aspect «génie logiciel» de mon travail.

Monsieur Denis Ablitzer, Professeur à l'Ecole des Mines de Nancy et Directeur du laboratoire LSG2M, m'a fait l'honneur d'être un rapporteur attentif et éclairé, bien que cela représentât pour lui une charge de travail supplémentaire importante. Je le remercie particulièrement, ainsi que Jean-Pierre Bellot et Alain Jardy du LSG2M de Nancy, pour m'avoir «supporté» pendant les deux années de notre collaboration au sein de l'ARC.

Cette tâche de rapporteur a été partagée avec Jalil Ouazzani, Directeur de la société ARCO-FLUID à Marseille. J'ai été heureux de partager avec lui mes vues sur les nouvelles méthodes numériques et de programmation.

Bien d'autres personnes ont contribué à l'aboutissement de mon travail, je pense en particulier à Bernard Antoni, chercheur au CEN de Saclay, qui a non seulement bien voulu participer au jury, mais a aussi fortement investi de son temps pour me faire bénéficier des résultats expérimentaux obtenus au CEA. C'est une grande satisfaction pour moi de savoir que les quelques idées présentées ici seront reprises et développées par quelqu'un d'aussi enthousiaste et compétent.

Si je suis revenu faire ma thèse au MADYLAM ce n'est pas par hasard, mais parce que je m'y suis senti à l'aise (intellectuellement parlant bien entendu, le confort de la «cafet» n'ayant rien à voir avec cette décision... quoique).

Je voudrais donc remercier tous les membres du laboratoire, même s'ils ne sont pas directement intervenus dans le déroulement de ce travail, mais qui, par leur simple présence, ont rendu agréables et enrichissantes ces quelques années passées en leur compagnie.

Table des matières

Symboles et notations	5
Introduction	7
1 Présentation générale	9
1.1 Le contexte industriel.....	9
1.2 Présentation générale de l'effet Marangoni	12
1.3 Travaux antérieurs sur l'effet Marangoni	13
2 Equations de conservation en coordonnées curvilignes générales	15
2.1 Equations de conservation et de transport	15
2.2 Formes conservatives faibles et fortes.	16
2.3 Projection des équations de quantité de mouvement	17
2.3.1 Forme conservative semi-forte	17
2.3.2 Forme conservative forte.....	18
2.4 Formes covariantes et contravariantes	19
2.4.1 Composantes contravariantes	19
2.4.2 Composantes covariantes	19
2.5 Forme finale retenue	20
3 Modèles de turbulence	21
3.1 Equations de Reynolds.....	21
3.2 Fermeture de la turbulence.....	21
3.2.1 Equations de transport de k et ϵ	22
3.2.2 Constantes du modèle k - ϵ	23
3.3 Interaction fluide-paroi, conditions aux limites	23
3.3.1 Les fonctions de paroi	24
3.3.2 Les modèles "bas Reynolds"	24
4 Discrétisation des équations de transport	27
4.1 Présentation de la méthode des volumes finis	27
4.2 Discrétisation de l'équation de transport	29
4.2.1 Terme instationnaire	29
4.2.2 Terme de diffusion.....	30
4.2.3 Terme de convection	33
4.2.4 Termes sources	37
4.3 Discrétisation des conditions aux limites.....	39
4.3.1 Conditions aux limites pour les scalaires	39
4.3.2 Conditions aux limites pour la vitesse	40
4.4 Quelques aspects de la programmation objet.....	41

4.4.1 Terminologie du C++ et notions fondamentales	41
4.4.2 La bibliothèque de calcul tensoriel	42
5 Méthodes de résolution des équations de transport	45
5.1 Procédure de résolution SIMPLE	45
5.1.1 Equations de correction de la vitesse et de la pression	45
5.1.2 Algorithme de résolution SIMPLE	47
5.1.3 Conditions aux limites pour la correction de pression	48
5.2 Procédure de résolution SCGS	48
5.2.1 Améliorations de SCGS	51
5.2.2 Algorithme pour SCGS	51
5.2.3 Avantages de SCGS sur SIMPLE	51
5.2.4 Conditions aux limites en pression	52
5.3 Conclusion sur les méthodes numériques	52
6 Ecoulement thermocapillaire sous la tâche chaude	53
6.1 Le modèle de Chan et Sanochkin	53
6.1.1 Domaine de validité des équations (24) et (25)	54
6.1.2 Structure de la couche limite	56
6.1.3 Température en surface	56
6.1.4 Profil de vitesse en surface	56
6.1.5 Correspondance entre loi parabolique et distribution gaussienne	57
6.2 Comparaison entre les modèles numériques et analytiques	57
6.3 Comparaison avec les résultats de [Sanochkin 87]	58
6.3.1 Formulation du problème	58
6.3.2 Caractéristiques de l'écoulement thermocapillaire	59
6.3.3 Analyse et comparaison des résultats	60
6.4 Comparaison avec le modèle de Chan/Sanochkin	61
6.4.1 Vérification du caractère linéaire de la vitesse sous le faisceau	61
6.4.2 Evolution de la température maximale en surface en fonction de Q	62
6.5 Analyse des résultats	62
6.6 Mise en évidence d'un nombre de Marangoni critique	64
6.6.1 Pour la température maximale en surface	64
6.6.2 Pour la vitesse maximale en surface	65
6.7 Conclusions sur le modèle de Chan et Sanochkin	66
7 Modèle complet à grand nombre de Reynolds de l'effet thermocapillaire	67
7.1 Analyse en ordre de grandeur	67
7.1.1 Formulation adimensionnelle	68
7.1.2 Ecoulement visqueux : $A^2 Re_\sigma \ll 1$	69
7.1.3 Ecoulement en couche limite : $A^2 Re_\sigma \gg 1$	69
7.1.4 Influence de la convection naturelle	70
7.1.5 Caractéristiques d'un écoulement thermocapillaire à grand nombre de Reynolds et faible nombre de Prandtl	71
7.2 Modélisation — application au mercure	71
7.2.1 Choix des paramètres	71

7.2.2	Vérification des lois d'échelle pour l'effet thermocapillaire	72
7.2.3	Importance relative de la convection naturelle et de l'effet thermocapillaire	74
7.3	Déformation de la surface libre.....	79
7.3.1	Présentation de la méthode de calcul de la surface libre.....	80
7.3.2	Algorithme complet de calcul de la déformation	82
7.3.3	Analyse des simulations avec surface libre	83
8	Application à la refusion du Titane	85
8.1	Paramètres de la simulation	85
8.2	Caractéristiques de la turbulence interfaciale	85
8.3	Evolution du débit d'évaporation en fonction de la focalisation	89
8.4	Limites du modèle d'évaporation et de déformation de la surface.....	92
	Conclusion.....	93
A	Eléments de calcul tensoriel.....	97
A.1	Transformation de coordonnées.....	97
A.2	Composantes covariantes, contravariantes, mixtes.....	98
A.2.1	Métrie	98
A.2.2	Symboles de Christoffel.....	99
A.2.3	Dérivées covariantes	100
A.3	Composantes physiques	100
A.3.1	Composantes physiques du tenseur métrique.....	101
A.3.2	Symboles de Christoffel physiques.....	102
A.3.3	Dérivées covariantes des composantes physiques.....	102
A.4	Opérateurs algébriques.....	103
B	Calcul des paramètres du modèle de Sanochkin	105
B.1	Algorithme de calcul.....	105
B.2	Listing du programme "sanochkin.cxx"	106
C	Validation des méthodes numériques	109
C.1	Ecoulement de Couette plan	109
C.1.1	Maillage orthogonal	109
C.1.2	Maillage non orthogonal	110
C.2	Diffusion numérique des schémas de convection.....	112
C.3	Convection naturelle à grand nombre de Rayleigh.....	113
C.4	Convection dans une boîte fermée à paroi défilante.....	115
	Propriétés physiques	119
	Références bibliographiques	121

Symboles et notations

Convention typographique :

Les grandeurs vectorielles et tensorielles sont représentées en **caractères gras** lorsque la variance n'est pas explicitement écrite.

Tableau 1. Grandeurs hydrodynamiques

Symbole	Nom	Unité
δ_k	épaisseur de la couche limite thermique	m
δ_v	épaisseur de la couche limite cinématique	m
D	tenseur du taux de déformation	s ⁻¹
ε	taux de dissipation de l'énergie cinétique de la turbulence	m ² s ⁻³
g	accélération de la pesanteur	m s ⁻²
k	énergie cinétique de la turbulence	m ² s ⁻²
μ	viscosité dynamique	Pa s
ν	viscosité cinématique	m ² s ⁻¹
τ	tenseur des contraintes de cisaillement	Pa
T	tenseur des contraintes	Pa
V	vecteur vitesse	m s ⁻¹

Tableau 2. Propriétés physiques

Symbole	Nom	Unité
α	diffusivité thermique	m ² s ⁻¹
β	coefficient de dilatation thermique	K ⁻¹
σ	tension superficielle	Nm ⁻¹
σ_T	coefficient de tension superficielle	Nm K ⁻¹
C_p	chaleur massique à pression constante	J kg ⁻¹ K ⁻¹
κ	conductivité thermique	W m ⁻¹ K ⁻¹
T	température	K
T_b	température d'évaporation	K
T_f	température de fusion	K

Tableau 2. Propriétés physiques (Suite)

Symbole	Nom	Unité
T_s	température de solidification	K
ρ	masse volumique	kg m^{-3}
q, Q	densité de flux thermique	W m^{-1} ou W m^{-2}
P	puissance	W

Tableau 3. Grandeurs tensorielles (exprimées sans variance)

Symbole	Nom
e, f	bases de projection
g	tenseur métrique
Γ	symbole de Christoffel
dx, ds, dv	éléments de longueur, surface et volume
∇a	dérivation d'un tenseur a
$a \otimes b$	produit tensoriel
$a \cdot b$	produit scalaire

Tableau 4. Variance des tenseurs

Symbole	Nom
$\square^i, \square^{(i)}$	composantes contravariantes (physiques)
$\square_i, \square_{(i)}$	composantes covariantes (physiques)

Introduction

Le sujet de ce mémoire concerne l'étude des structures d'écoulement engendrées par l'effet Marangoni thermique, ou effet thermocapillaire, lorsqu'un métal liquide est chauffé par un apport localisé d'énergie, comme dans les procédés industriels d'élaboration des métaux à haut point de fusion, tels que le Titane et ses alliages, qui utilisent un faisceau électronique pour fondre et purifier un lingot métallique.

Mais, d'une façon plus générale, l'effet thermocapillaire intervient dès lors que la surface libre d'un liquide n'est pas à une température uniforme. Citons par exemple les traitements de surface (par faisceau laser ou électronique), les procédés de fusion de zone ou les méthodes Bridgman et Czochralski.

L'originalité du travail présenté réside dans les aspects suivants :

- Etude du comportement thermohydrodynamique du bain dans le cas de fortes densités de puissance thermique
- Approche analytique du problème et vérification des prédictions par un modèle numérique
- Utilisation de ce modèle numérique pour le calcul d'écoulements dans des configurations industrielles

Le premier point sera présenté en détail aux chapitres 1 et 6 où nous montrerons que les configurations étudiées et les puissances envisagées n'ont pas fait l'objet d'études approfondies.

Le second point permettra de mettre en évidence les paramètres pertinents liés à notre problème et illustrera les possibilités de notre modèle numérique, en particulier l'efficacité des méthodes exposées aux chapitres 2 à 5. Ceci constituera la matière des chapitres 7 et 8.

Le dernier point constitue une application directe des études précédentes, il concernera en particulier l'influence de la focalisation sur l'évaporation d'un bain de Titane lorsque les effets de la turbulence et du creusement de la surface sont ou non pris en compte.

Nous avons limité notre étude au cas de matériaux purs, autrement dit les effets des éléments d'alliage sur la tension superficielle (effet Marangoni solutal) et leur évaporation ne seront pas pris en compte. De même, l'aspect solidification et l'influence éventuelle d'un tirage ont été écartés de cette étude.

Nous avons par contre porté notre attention sur l'influence de la convection naturelle et son importance vis à vis de l'effet thermocapillaire. Cette démarche simplificatrice à l'avantage de pouvoir être confrontée à une analyse paramétrique et donc de permettre une étude précise des mécanismes mis en jeu.

1 Présentation générale

Nous présentons dans ce premier chapitre le contexte industriel et les éléments fondamentaux concernant les travaux actuels sur l'effet thermocapillaire.

1.1 Le contexte industriel

Les métaux réfractaires utilisés dans l'aéronautique doivent répondre à des normes de composition et teneur en impuretés très strictes. Dans le cas du Titane, l'enjeu économique est important car il entre dans la composition de la majorité des organes mobiles des réacteurs civils et militaires. Il suffit de savoir que depuis 1977 cinq accidents aériens¹ ont été attribués à la présence d'impureté de type *Hard Alpha*² dans des composants de moteur pour comprendre que, sous la pression des pouvoirs publics, une étude approfondie des mécanismes de formation, d'élimination et de détection de ces particules a été entreprise — principalement aux Etats-Unis — dès 1983. Les conclusions de cette enquête démontrent que le procédé *triple VAR* généralement utilisé pour purifier le Titane (voir figure 1) est inadapté pour l'obtention d'un Titane "zéro défaut" puisque pas moins de 28 sources potentielles d'impuretés ont été identifiées. Parmi les procédés susceptibles de remplacer le triple VAR figurent en bonne place les procédés PAM (Plasma Arc Melting) et EBM (Electron Beam Melting) tel que le procédé EBCHR de la figure 2.

Une autre étude, basée sur les résultats d'expériences d'ensemencement contrôlé de lingots de Titane, tendrait à montrer la capacité des procédés EBM à éliminer, grâce à la possibilité de vaporiser localement le métal, la quasi-totalité des impuretés.

Depuis quelques années, les procédés EBM ont la préférence des constructeurs et des fondeurs aéronautiques et il est envisagé de modifier les normes de qualité des alliages afin de rendre caduque les lingots obtenus par les autres procédés. Les conséquences d'un tel changement dans les règlements auraient un fort impact sur l'économie aéronautique française, car les principales sources de métaux réfractaires (CEZUS entre autres) des constructeurs tels que la SNECMA ne sont pas équipés de procédés EBM.

Dès lors se pose la question de l'investissement en procédés EBM et de leur réelle efficacité. En effet, les rares données disponibles sur les conditions d'exploitation des sites industriels sont sujettes à caution car protégées par le secret industriel. C'est dans ce contexte qu'a été constituée en 1989 sous l'impulsion du PIRSEM une ARC (Action de Recherche Concertée) intitulée "Refusion – Purification par bombardement électronique des métaux et alliages réfractaires" regroupant quatre laboratoires³ dont l'objectif est de parvenir à une bonne com-

¹ Source GE Aircraft Engine

² Solution solide nitrurée de Ti, C, W...

³ LSG2M à Nancy, Centre d'étude des matériaux de Corbeil, LTPCM et MADYLAM de Grenoble

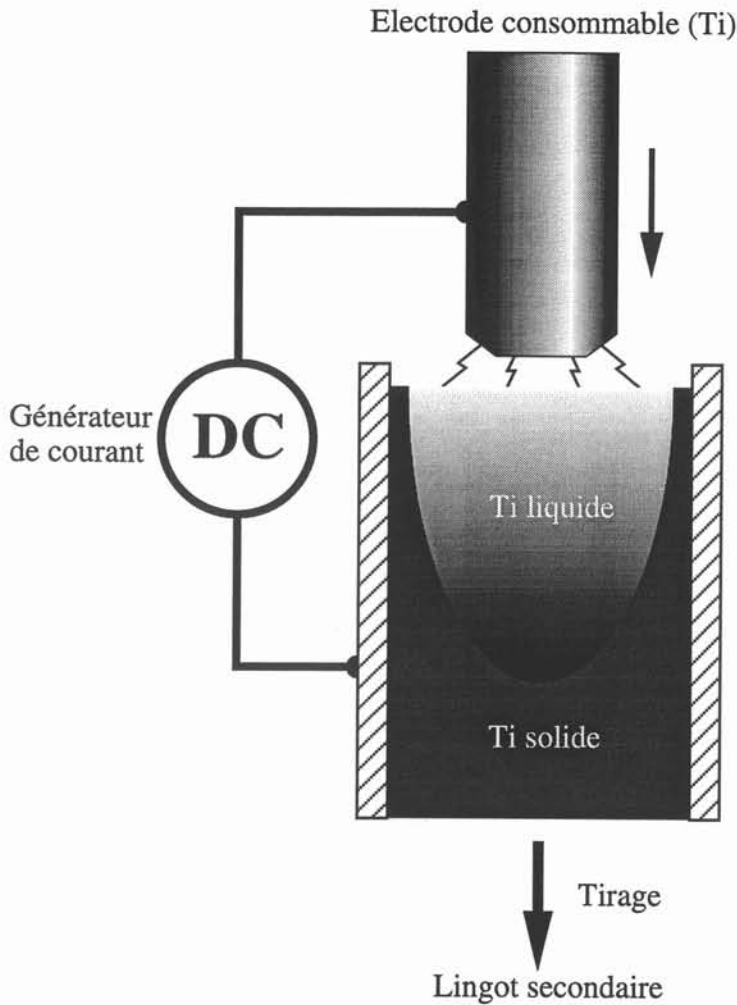


Figure 1. Schéma de principe du procédé Triple VAR (Vacuum Arc Remelting). Dans une enceinte sous vide poussé, l'électrode à purifier est fondue par un arc électrique généré entre les parties métalliques. Le lingot obtenu est ensuite utilisé comme électrode consommable dans une autre opération de fusion. Cette opération, répétée trois fois, donne son nom au procédé.

préhension des mécanismes de purification intervenant principalement à l'interface liquide/vide, avec la contrainte que les résultats obtenus doivent pouvoir s'appliquer dans les procédés discontinus *Drip Melting* et continus EBCHR (puisque dans les deux cas il s'agit de l'interaction d'un métal avec une source thermique de grande puissance). La répartition des études entre les différents partenaires, retenue en fonction de leurs compétences, est la suivante:

- Le LSG2M étudie l'hydrodynamique globale grâce à un modèle quasi-stationnaire du lingot secondaire en portant son effort sur les phénomènes de convection thermique et sur les aspects thermodynamiques du processus de purification.
- Les données concernant le comportement des alliages et les différents équilibres thermodynamiques (inclusion/matrice, éléments d'addition/matrice) sont déterminées par le LTPCM.
- Les moyens d'analyse du Centre des Matériaux de Corbeil sont mis à profit pour caractériser des échantillons, en particulier les profils de concentration à l'interface inclusion/métal. Ces données sont nécessaires à la vérification des

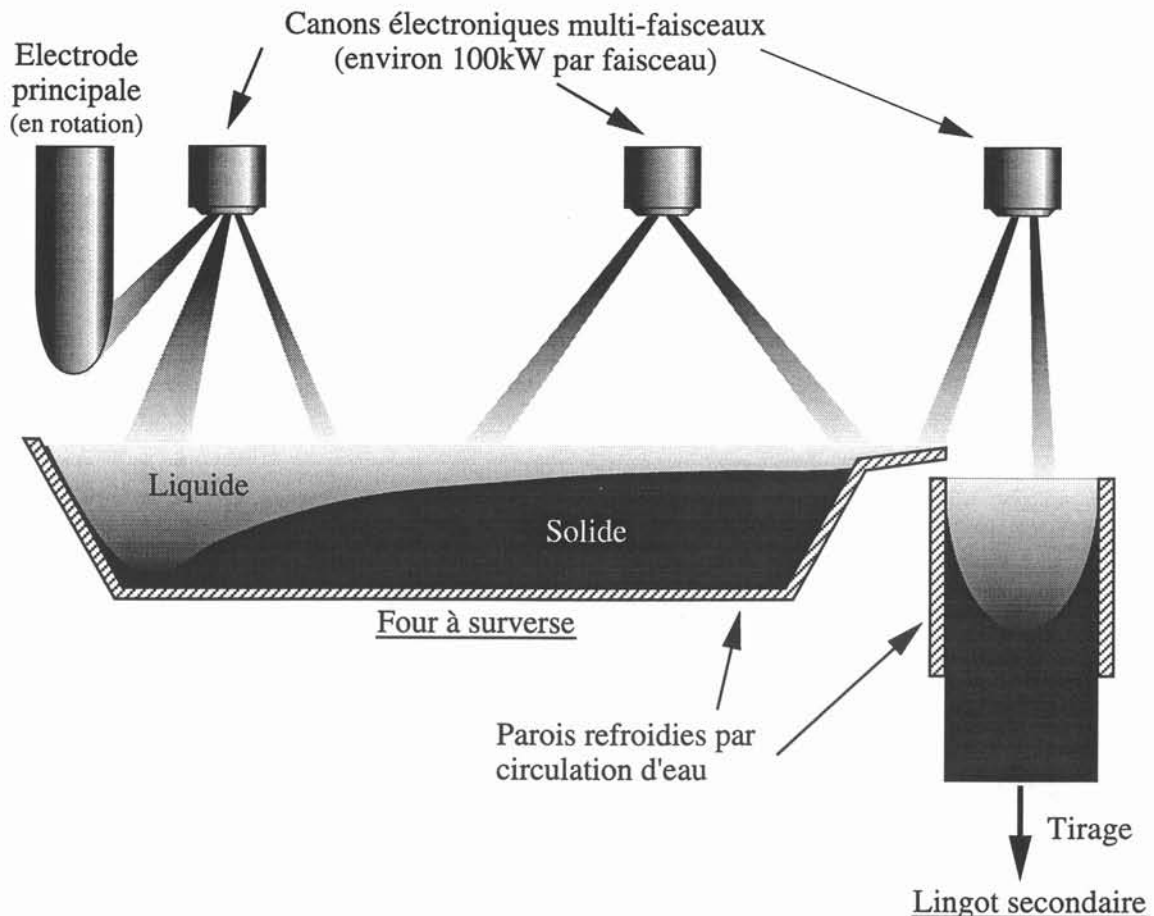


Figure 2. Schéma de principe du procédé continu Electron Beam Cold Hearth Refining (EBCHR)

mécanismes de dissolution proposés par le LTPCM.

- Le MADYLAM étudie, par une approche plus fondamentale, les phénomènes couplés de transfert de masse et de chaleur à l'interface métal liquide/vide en portant son attention sur les modifications apportées par l'effet Marangoni et la turbulence interfaciale, cette démarche devant permettre le choix des phénomènes à introduire dans une modélisation globale du procédé EBCHR et de dégager les tendances dans le comportement du puits liquide en fonction des conditions opératoires.

Les conséquences de ce programme d'étude sur le travail présenté dans ce mémoire concerne essentiellement les configurations géométriques étudiées et le mode de dépôt du flux thermique. Ainsi, nous nous sommes restreint à l'étude de géométries axisymétriques et à des faisceaux de puissance et de focalisation variables dont la densité d'énergie suit une loi gaussienne. D'autre part les modifications introduites par la présence d'un front de solidification n'ont pas été abordées, toutes nos simulations ont été effectuées dans une cavité maintenue à la température de fusion du métal.

Cependant, afin que ces travaux conservent leur cohérence vis à vis du procédé à modéliser, nous avons conçu notre modèle numérique de façon à pouvoir prendre en compte les phéno-

mènes de solidification et de tirage dans des géométries quelconques.

1.2 Présentation générale de l'effet Marangoni

La convection capillaire (ou Marangoni) apparaît dans les liquides présentant une surface libre pour lesquels la tension de surface σ est susceptible d'être modifiée par la présence d'éléments tensio-actifs (même en très faible teneur) ou par des gradients de température. En effet, l'équilibre des contraintes tangentielles en surface s'écrit, d'une façon générale :

$$(\tau_{ij} - p\delta_{ij})t_j = t_j \frac{\partial \sigma}{\partial x^j}$$

Cette expression traduit le fait que les contraintes tangentielles du fluide doivent compenser celles induites par les variations de tension superficielle le long de l'interface, la conséquence directe de cette relation étant que le fluide est nécessairement en mouvement si la tension superficielle n'est pas constante. Le gradient de tension superficielle est en général inconnu, mais on peut l'écrire, en supposant que $\sigma = \sigma(T, C_n)$ est une fonction de la température et des concentrations C_n des éléments d'addition¹, de la façon suivante :

$$\frac{\partial \sigma}{\partial x^j} = \frac{\partial \sigma}{\partial T} \cdot \frac{\partial T}{\partial x^j} + \sum_n \frac{\partial \sigma}{\partial C_n} \cdot \frac{\partial C_n}{\partial x^j}$$

Cette relation constitutive nous montre que les gradients thermiques et solutaux sont des forces motrices. Dans la suite de ce travail nous ne considérerons que les corps purs pour lesquels seule la contribution du gradient thermique sera prise en compte. Il se trouve que pour la plupart des métaux liquides nous avons :

$$\frac{\partial \sigma}{\partial T} = \sigma_T \equiv \text{cte} < 0$$

et la condition d'équilibre en surface, ou condition thermocapillaire, s'écrit dans un repère local (n, t) lié à l'interface :

$$\tau_n - p = \sigma_T \cdot \frac{\partial T}{\partial t}$$

Puisque ici $\sigma_T < 0$, le liquide subit une force dirigée vers les gradients négatifs, c'est-à-dire qu'il est "poussé" des régions chaudes vers les régions froides. Cette relation indique aussi que le moteur de l'effet thermocapillaire est le gradient thermique le long de la surface, un mouve-

¹ Cette hypothèse suppose aussi qu'il n'y a pas d'interaction entre plusieurs constituants, ce qui est loin d'être le cas, sauf pour les solutions infiniment diluées.

ment peut donc être généré même dans le cas de très faibles températures.

1.3 Travaux antérieurs sur l'effet Marangoni

Historiquement, la reconnaissance de l'importance du phénomène capillaire a été faite en 1855 par J. Thomson (frère aîné de Lord Kelvin) sur des "larmes de vin", c'est-à-dire la formation de films minces de substances alcoolisées. L'explication donnée par Thomson était exacte mais n'a pas suscité d'intérêt jusqu'en 1889, date à laquelle Gustav van der Mensbrugghe publie une étude complète des mouvements résultants de variations de la tension superficielle. Mais, deux années plus tard, Carlo Marangoni se proclame l'auteur de l'étude et le nom de Thomson tombe dans l'oubli, alors que celui de Marangoni passe à la postérité.

Plus récemment, l'étude de l'effet "Marangoni" a suscité l'intérêt des métallurgistes s'intéressant aux méthodes d'élaboration en microgravité ou sous champ magnétique. En effet, dans les conditions opératoires ordinaires les forces volumiques de thermoconvection agissent au même titre que les forces capillaires, mais dès lors qu'un contrôle de la convection naturelle est nécessaire (le plus souvent en la supprimant) les effets capillaires deviennent prépondérants.

Presque tous les travaux sur l'effet Marangoni utilisent des géométries simples, rectangulaires en général, avec un chauffage différentiel des parois latérales, le fluide utilisé étant soit une huile soit un métal à bas point de fusion (étain, plomb, métal de Wood), les premiers ayant l'avantage d'être transparents mais les seconds ayant un nombre de Prandtl proche de ceux utilisés en élaboration.

Les aspects théoriques ont été étudiés par un grand nombre d'auteurs dont Levich, Ostrach et, pour les aspects dynamiques et la stabilité de la surface, Davis. A partir de 1989, une démarche alliant une approche expérimentale et une approche numérique a été conduite par H. Ben Hadid de l'Ecole centrale de Lyon et le CEREM du Centre d'Etudes Nucléaires de Grenoble sur une cavité rectangulaire avec un chauffage différentiel remplie d'un alliage Sn-Bi (voir [Tosello 93]). L'étude paramétrique du chapitre 7 s'inspire de leurs travaux et observations.

De façon similaire, l'étude des instabilités capillaires à fort nombre de Marangoni dans les procédés de fusion de zone est entreprise à l'aide de moyens numériques dès 1990 par l'équipe de A. Roux et P. Bontoux à Marseille.

En ce qui concerne l'étude des effets thermocapillaires dans des configurations du type bombardement électronique, nous avons utilisé les travaux analytiques de Sanochkin et de Chan pour leur modèle d'écoulement sous la tâche chaude et les résultats des simulations de Sanochkin et Rivàs. Notons que d'autres auteurs ont proposé des calculs dans des configurations similaires sur de l'Aluminium (Tsai, Kou, Szekely) mais fournissent peu d'informations quantitatives.

Enfin, nous n'avons pas eu accès à des résultats expérimentaux (tels que le débit d'évaporation ou la température maximale en surface) fiables — difficiles à obtenir en tout état de cause — concernant le Titane : seuls les articles de Soubbaramayer et Blumenfeld du CEA de Saclay sur du Cerium ont permis une analyse critique de nos prédictions.

2 Equations de conservation en coordonnées curvilignes générales

Les équations servant à décrire le comportement du fluide sont parfaitement connues, mais leur utilisation dans le cadre d'une procédure de résolution numérique soulève quelques problèmes. Ce sont ces difficultés que nous allons analyser, notre but étant d'obtenir *in fine* un système d'équations se prêtant aux exigences des méthodes numériques (discrétisation facile, stabilité, coût en calcul faible) et pouvant s'adapter à une large gamme de problèmes physiques (nombre d'inconnues principales variable, topologie du domaine de calcul la moins restrictive possible). Afin d'alléger la présentation, nous avons reporté à l'annexe A les notations et définitions des méthodes de calcul tensoriel que nous allons utiliser.

2.1 Equations de conservation et de transport

La conservation de la masse, de la quantité de mouvement et d'une quantité scalaire (température, concentration, ...) peuvent s'écrire sous la forme suivante :

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho \mathbf{V}) &= 0 \\ \frac{\partial}{\partial t}(\rho \mathbf{V}) + \text{div}(\rho \mathbf{V} \otimes \mathbf{V} - \mathbf{T}) &= \mathbf{S}_v \\ \frac{\partial}{\partial t}(\rho \phi) + \text{div}(\rho \phi \mathbf{V} - \mathbf{q}) &= S_\phi\end{aligned}\tag{1}$$

Dans ce système, la densité ρ , la vitesse \mathbf{V} et le scalaire ϕ sont les variables dépendantes principales. Pour la fermeture du système, il faut établir des relations définissant le tenseur des contraintes et le vecteur flux en fonction de ces variables. Dans le cas d'un fluide Newtonien, le tenseur des contraintes est donné par la loi de Stokes :

$$\mathbf{T} = -\left(p + \frac{2}{3}\mu \text{div}(\mathbf{V})\right)\mathbf{I} + 2\mu \mathbf{D}$$

dans laquelle p est la pression, μ la viscosité, \mathbf{I} le tenseur unité et \mathbf{D} le tenseur du taux de déformation correspondant à la partie symétrique du tenseur gradient de vitesse.

Le vecteur flux est en général donné par une loi de Fourier :

$$\mathbf{q} = h_\phi \text{grad} \phi \text{ dans laquelle } h_\phi \text{ est la diffusivité ou la conductivité du scalaire.}$$

Les termes de droite des équations du système (1) représentent les sources ou les puits des variables correspondantes.

Ces équations, écrites sous forme vectorielle, sont compactes et traduisent bien le phénomène physique qu'elles modélisent. Mais pour obtenir une forme pratique — calculable — des opérateurs divergence et produit tensoriel il faut se donner une base de projection. La théorie du calcul tensoriel permet d'uniformiser la notation et d'en alléger la lecture, mais elle laisse à l'utilisateur un certain nombre de choix. En particulier, les vecteurs et tenseurs peuvent être exprimés en termes de composantes covariantes ou contravariantes¹. Une difficulté supplémentaire vient du choix de la base de projection pour ces composantes, choix qui conditionne la forme des équations (conservative ou non, faible ou forte).

Nous allons donc analyser les divers cas possibles et expliciter notre choix.

2.2 Formes conservatives faibles et fortes.

Dans cette discussion, nous utiliserons les composantes contravariantes, les conclusions étant générales. Le développement le plus simple de (1) fait intervenir les composantes contravariantes, l'opérateur divergence prenant la forme définie par les relations (47) et (49) de l'annexe A. On obtient alors :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x^j} (\rho V^j) + \Gamma_{jm}^j \rho V^m &= S_m \\ \frac{\partial}{\partial t} (\rho V^i) + \frac{\partial}{\partial x^j} (\rho V^i \cdot V^j - T^{ij}) + \Gamma_{jm}^i (\rho V^m \cdot V^j - T^{mj}) + \Gamma_{jm}^j (\rho V^i \cdot V^m - T^{im}) &= S_{V^i} \\ \frac{\partial}{\partial t} (\rho \phi) + \frac{\partial}{\partial x^j} (\rho \phi V^j - q^j) + \Gamma_{jm}^j (\rho \phi V^m - q^m) &= S_\phi \end{aligned} \quad (2)$$

L'opérateur divergence s'exprime à l'aide des dérivées covariantes et pour un champ de vecteurs il prend la forme conservative suivante :

$$\text{div}(\mathbf{a}) = \nabla_j (a^j) = \frac{1}{\sqrt{g}} \cdot \frac{\partial}{\partial x^j} (\sqrt{g} a^j) \quad (3)$$

dans laquelle $g^{1/2}$ est le Jacobien de la transformation locale de coordonnées.

Nous noterons par la suite $\frac{1}{\sqrt{g}} \cdot \frac{\partial}{\partial x^j} (\sqrt{g} (...)) = \frac{\Delta}{\Delta x^j} (...)$ afin de simplifier l'écriture des

équations. Avec cette notation la définition (3) devient : $\text{div}(\mathbf{a}) = \frac{\Delta}{\Delta x^j} (a^j)$

De la même façon pour un champ de tenseurs \mathbf{A} :

$$\text{div}(\mathbf{A}) = (\nabla_j A^{ij}) \mathbf{e}_i = \left(\frac{\Delta}{\Delta x^j} A^{ij} + A^{mj} \Gamma_{mj}^i \right) \mathbf{e}_i = \frac{\Delta}{\Delta x^j} (A^{ij} \mathbf{e}_i)$$

¹ Auxquelles il faut ajouter les composantes dans les bases normées physiques et duales physiques.

Avec ce nouvel opérateur divergence, le système (2) devient :

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\Delta}{\Delta x^j}(\rho V^j) &= S_m \\
 \frac{\partial}{\partial t}(\rho V^i e_i) + \frac{\Delta}{\Delta x^j}((\rho V^i \cdot V^j - T^{ij}) e_i) &= S_{V^i} e_i \\
 \frac{\partial}{\partial t}(\rho \phi) + \frac{\Delta}{\Delta x^j}(\rho \phi V^j - q^j) &= S_\phi
 \end{aligned} \tag{4}$$

La principale différence entre les systèmes (2) et (4) vient de la présence de termes non différentiels exprimés à l'aide des symboles de Christoffel issus de l'opérateur divergence : dans le second système ces termes ont été incorporés à l'opérateur différentiel $\Delta/\Delta x^j$. De ce fait, l'intégration de ces équations selon les lignes de coordonnées x^j conduit à des intégrales différentielles exactes qui ne dépendent que des valeurs aux limites. En termes numériques, après une discrétisation appropriée, les termes de flux s'annulent par paire aux faces des volumes de contrôle et seuls les termes aux limites subsistent¹ : la discrétisation est alors conservative. Dans le cas du système (2) les termes non différentiels représentent l'influence de la courbure de l'espace sur le transport de la variable et n'ont pas *a priori* de raison de respecter la conservation de la quantité correspondante : ces équations sont faiblement conservatives².

2.3 Projection des équations de quantité de mouvement

Les équations de quantité de mouvement font intervenir les vecteurs de base e_i , il faut donc définir une projection sur cette base. Cette projection devant se faire dans des directions spécifiques rend plus délicate l'application d'une forme conservative forte. En effet, la quantité conservée étant le vecteur quantité de mouvement, ses composantes ne le sont pas si les directions de projection ne sont pas constantes dans l'espace : il faut alors tenir compte d'un transfert de quantité de mouvement d'une direction à l'autre.

2.3.1 Forme conservative semi-forte

La projection la plus naturelle consiste à utiliser la base e_i et à effectuer le produit scalaire avec la base duale e^j . Le système (4) devient alors :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho V^i) + \frac{\Delta}{\Delta x^j}(\rho V^i \cdot V^j - T^{ij}) + \Gamma_{mj}^i(\rho V^m \cdot V^j - T^{mj}) = S_{V^i} \tag{5}$$

¹ Bien entendu il s'agit d'un cas simplifié dans lequel les propriétés physiques sont constantes et en l'absence de sources. Cependant, comme le montre Patankar [Patankar 80] les discrétisations des équations *doivent* vérifier ces caractéristiques de base avant d'envisager des formes plus complexes.

² Dans un système de coordonnées cartésiennes les symboles de Christoffel étant identiquement nuls les deux formes sont équivalentes.

L'apparition des symboles de Christoffel dans cette projection montrent que la forme n'est plus fortement conservative. Cependant, ce terme suppl mentaire — qui traduit la redistribution de la quantit  de mouvement entre les diff rentes directions de projection — peut  tre conservatif lorsqu'une discr tisation appropri e (par quart de maille, interpolation par des polyn mes de Lagrange) est utilis e. Afin de distinguer entre le syst me (4) naturellement fortement conservatif et le syst me (4) associ    la projection (2), ce dernier est dit semi-fortement conservatif.

2.3.2 Forme conservative forte

Pour obtenir une forme conservative forte il faut donc projeter (4) dans des directions invariantes dans l'espace. Ceci peut  tre accompli de deux fa ons :

- Soit en exprimant les vecteurs de base \mathbf{e}_i suivant une base constante \mathbf{f}_i par combinaison lin aire : $\mathbf{e}_i = c_i^m \mathbf{f}_m$
- Soit en exprimant les composantes du vecteur vitesse et du tenseur des contraintes dans cette base : $\mathbf{V} = U^i \mathbf{f}_i$, $\mathbf{T} = \tau^{ij} (\mathbf{f}_i \otimes \mathbf{f}_j)$

Dans le premier cas on conserve pour inconnues les composantes contravariantes de la vitesse, l' quation de quantit  de mouvement devient :

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} (\rho V^m c_m^i) + \frac{\Delta}{\Delta x^j} [(\rho V^j V^m - T^{jm}) c_m^i] \right) \mathbf{f}_i = S_{V^m} c_m^i \mathbf{f}_i \quad (6)$$

Dans le second cas, ce sont les composantes de la vitesse dans le rep re fixe qui sont calcul es :

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} (\rho U^i) + \frac{\Delta}{\Delta x^j} [(\rho U^j U^m - \tau^{jm}) d_m^i] \right) \mathbf{f}_i = S_{U^m} \mathbf{f}_i \quad \text{avec : } d_m^j = \mathbf{f}_m \cdot \mathbf{e}^j \quad (7)$$

En ce qui concerne l' quation (6), un inconv nient majeur au niveau du stockage et du temps de calcul l'emp che d' tre pratiquement utilisable dans une proc dure it rative de r solution (cf. [Demirdzic 82]). Ce probl me n'existe pas pour l' quation (7) qui est plus facilement calculable puisque les composantes du tenseur τ^{ij} sont plus simple que celles de \mathbf{T}^{ij} et font r f rence   une base fixe et ne contiennent donc pas de termes de courbure.

Les  quations de transport d'un scalaire et de continuit  sont inchang es si on utilise la projection (6), par contre dans l'autre syst me elles prennent les formes suivantes :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\Delta}{\Delta x^j} (\rho U^m d_m^j) = S_m \quad \frac{\partial}{\partial t} (\rho \phi) + \frac{\Delta}{\Delta x^j} [(\rho U^m - q^j) d_m^j] = S_\phi \quad (8)$$

Les équations (8) sont plus compliquées que leur contrepartie dans (2) puisqu'il y a une sommation supplémentaire sur m . D'une façon générale les formes conservatives fortes (6), (7) et (8) contiennent plus de termes que la forme conservative semi-forte, notamment en raison de la forme linéaire des vecteurs de base \mathbf{f}_i . De plus un phénomène d'instabilité numérique a été rencontré lorsqu'un algorithme itératif de type SIMPLE est utilisé (voir [Piquet 89]). Pour cet ensemble de raisons, nous avons choisi d'utiliser la formulation conservative semi-forte (système (4) associé à (2)).

2.4 Formes covariantes et contravariantes

Nous avons précisé en préambule que la forme des équations est inchangée lorsqu'on les exprime à l'aide des composantes covariantes. Par contre la structure finale dépend du choix de la base. Nous allons maintenant examiner les propriétés des équations retenues en vue d'une formulation numérique pratique.

2.4.1 Composantes contravariantes

Le tenseur des contraintes et le vecteur flux s'écrivent :

$$\mathbf{T} = \left[- \left(p + \frac{2}{3} \mu \frac{\Delta V^m}{\Delta x^m} \right) g^{ij} + 2\mu D^{ij} \right] (\mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j) \quad \mathbf{q} = h_\phi \left(g^{jm} \frac{\partial \phi}{\partial x^m} \right) \mathbf{e}_j$$

Les équations de transport prennent la forme conservative semi-forte contravariante suivante :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\Delta}{\Delta x^j} (\rho V^j) &= S_m \\ \frac{\partial}{\partial t} (\rho \phi) + \frac{\Delta}{\Delta x^j} \left[\rho \phi - h_\phi g^{jm} \frac{\partial \phi}{\partial x^m} \right] &= S_\phi \\ \frac{\partial}{\partial t} (\rho V^i) + \frac{\Delta}{\Delta x^j} [\rho V^i V^j + 2\mu D^{ij}] + g^{ij} \frac{\partial}{\partial x^j} \left(p + \frac{2}{3} \mu \frac{\Delta V^m}{\Delta x^m} \right) + \Gamma_{mj}^i (\rho V^m V^j - 2\mu D^{mj}) &= S_{V^i} \end{aligned} \quad (9)$$

avec le tenseur métrique g^{ij} et l'opérateur différentiel $\Delta/\Delta x^j$ définis à l'annexe A.

2.4.2 Composantes covariantes

Dans la base \mathbf{e}^i :

$$\mathbf{T} = \left[- \left(p + \frac{2}{3} \mu \frac{\Delta}{\Delta x^m} (g^{mn} V_n) \right) g_{ij} + 2\mu D_{ij} \right] (\mathbf{e}^i \otimes \mathbf{e}^j) \quad \mathbf{q} = h_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x^j} \mathbf{e}^j$$

Le système complet a pour expression :

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\Delta}{\Delta x^j} (\rho g^{jm} V_m) &= S_m \\
\frac{\partial}{\partial t} (\rho V_i) + \frac{\Delta}{\Delta x^j} [g^{jm} (\rho V_i V_m + 2\mu D_{im})] + \frac{\partial}{\partial x^j} \left(p + \frac{2}{3} \mu \frac{\Delta}{\Delta x^m} [g^{mn} V_n] \right) - \\
\Gamma_{ij}^n [g^{jm} (\rho V_n V_m - 2\mu D_{mn})] &= S_{V_i} \\
\frac{\partial}{\partial t} (\rho \phi) + \frac{\Delta}{\Delta x^j} \left[g^{jm} \left(\rho \phi V_m - h_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x^m} \right) \right] &= S_\phi
\end{aligned} \tag{10}$$

2.5 Forme finale retenue

Les principales difficultés que l'on rencontre dans la conception d'une méthode numérique de résolution sont le traitement des termes de gradient de pression (la pression est une "pseudo-variable" qui n'a pas d'équation propre) et de convection, notamment ceux de la vitesse (termes non linéaires). Si nous examinons les propriétés des systèmes (9) et (10) de ce point de vue, nous constatons que le premier contient trois termes de convection par équation et trois termes de gradient de pression (somme sur j). Le second dispose de neuf termes de convection (somme sur m et j) mais un seul terme de gradient de pression. Ce sont les termes de gradient de pression qui affectent le plus la stabilité des algorithmes de résolution puisqu'il n'existe pas d'équation spécifique pour cette variable, alors que la présence de termes additionnels de convection impliquent "seulement" davantage de calculs. L'expérience montre toutefois que dans le cadre d'une procédure de type SIMPLE, par nature itérative, on peut négliger les gradients de pressions croisés devant les gradients normaux, au prix d'une vitesse de convergence plus faible¹. Nous avons donc retenu le système d'équations (9), mais exprimé en termes de composantes physiques, celles-ci permettant de garder une certaine cohérence sur l'interprétation physique des grandeurs principales.

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial t} (\sqrt{g} \rho) + \frac{\Delta}{\Delta x^{(j)}} (\rho V^{(j)}) &= S_m \\
\frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial t} (\sqrt{g} \rho V^{(i)}) + \frac{\Delta}{\Delta x^{(j)}} [\rho V^{(i)} V^{(j)} - \tau^{(ij)}] &= \begin{cases} S_V^{(i)} - g^{(ij)} \frac{\partial P}{\partial x^{(j)}} - \\ - \Gamma_{(mj)}^{(i)} (\rho V^{(m)} V^{(j)} - \tau^{(jm)}) \end{cases} \\
\frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial t} (\sqrt{g} \rho \phi) + \frac{\Delta}{\Delta x^{(j)}} \left[\rho \phi V^{(j)} - h_\phi g^{(jm)} \frac{\partial \phi}{\partial x^{(m)}} \right] &= S_\phi
\end{aligned} \tag{11}$$

$$\text{avec :} \quad \tau^{(ij)} = \mu [g^{(jm)} \nabla_{(m)} V^{(i)} + g^{(im)} \nabla_{(m)} V^{(j)}] \quad P = p + \frac{2}{3} \mu \frac{\Delta V^{(m)}}{\Delta x^{(m)}}$$

¹ Ceci est d'autant plus vrai que le maillage est faiblement non orthogonal, les termes hors diagonale du tenseur métrique étant dans ce cas négligeables.

3 Modèles de turbulence

Les équations présentées au chapitre 2 conviennent bien aux écoulements laminaires à faible nombre de Reynolds, mais sont insuffisantes dans le cas d'écoulements turbulents. Nous allons rapidement présenter le modèle de turbulence k-ε basé sur le concept de viscosité turbulente. Ce modèle disposant de quelques paramètres empiriques, nous passerons en revue trois formulations possibles, chacune ayant des avantages et des inconvénients selon le phénomène physique que l'on veut modéliser.

3.1 Equations de Reynolds

Dans l'approche statistique de la turbulence, toute grandeur physique ψ est décomposée en partie moyenne et partie fluctuante selon :

$$\psi = \bar{\psi} + \psi' \text{ dans laquelle } \bar{\psi} = \frac{1}{\delta t} \int_{-\delta t/2}^{\delta t/2} \psi(t + \tau) d\tau \text{ est la moyenne temporelle de } \psi.$$

L'intervalle de temps δt est supposé grand devant l'échelle de temps de la partie fluctuante (temps de retournement des gros tourbillons), et inférieur au temps caractéristique d'évolution de l'écoulement moyen. Les équations de transport ont la même forme que dans le système

(11) en remplaçant $V^{(i)}$ par $\bar{V}^{(i)}$ et font intervenir :

- Le tenseur des contraintes turbulentes : $\tau^{(ij)} = \overline{\tau^{(ij)}} + \tau_t^{(ij)} = \overline{\tau^{(ij)}} - \rho \overline{V'^{(i)} V'^{(j)}}$

où $\overline{\tau^{(ij)}}$ est le tenseur des contraintes exprimé à l'aide des vitesses moyennes.

- Le flux scalaire turbulent : $q^{(j)} = \overline{q^{(j)}} + q_t^{(j)} = \overline{q^{(j)}} - \rho \phi' \overline{V'^{(j)}}$

Il s'agit maintenant de relier les grandeurs fluctuantes aux variables principales afin de définir complètement le système d'équations.

3.2 Fermeture de la turbulence

Trois grandes familles de modèles permettent de fermer le système d'équations :

- Les modèles de simulation des grandes échelles de la turbulence (modèles L.E.S).

- Les modèles directs de calcul des tensions de Reynolds (modèles R.S.M).
- Les modèles basés sur le concept de viscosité tourbillonnaire de Boussinesq faisant intervenir soit une longueur de mélange (modèle k-l) soit un taux de dissipation de la turbulence (modèle k-ε).

Les deux premières familles sont moins utilisées car ces modèles requièrent un temps de calcul et de capacité mémoire importants, accessibles uniquement avec les supercalculateurs.

Dans cette étude nous avons donc opté pour le modèle k-ε.

3.2.1 Equations de transport de k et ε

A la base de ce modèle se trouve la notion (discutable) de viscosité et diffusivité turbulente définies par :

$$\mu_t = C_\mu \rho \frac{k^2}{\varepsilon} \quad \alpha_t = \frac{\nu_t}{\sigma_t} \quad (12)$$

avec C_μ une constante empirique et σ_t le nombre de Prandtl turbulent. Nous noterons par la suite μ_l la viscosité moléculaire, la viscosité effective du fluide est alors $\mu = \mu_l + \mu_t$

L'énergie cinétique de la turbulence k et son taux de dissipation ε sont définis par :

$$k = \frac{1}{2} \overline{V^{(i)} V^{(i)}} \quad \varepsilon = \frac{\mu_l}{\rho} g_{(im)} g^{(jn)} \overline{\nabla_{(n)} V^{(m)} \nabla_{(j)} V^{(i)}}$$

Les équations de transport de ces nouvelles variables sont les suivantes :

$$\frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial t} (\sqrt{g} \rho k) + \frac{\Delta}{\Delta x^{(j)}} \left[\rho k \nabla^{(j)} - \left(\mu_l + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) g^{(jm)} \frac{\partial k}{\partial x^{(m)}} \right] = P_k + G_k - \rho \varepsilon \quad (13)$$

$$\frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial t} (\sqrt{g} \rho \varepsilon) + \frac{\Delta}{\Delta x^{(j)}} \left[\rho \varepsilon \nabla^{(j)} - \left(\mu_l + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) g^{(jm)} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x^{(m)}} \right] = C_1 \frac{\varepsilon}{k} (P_k + G_k) \left(1 - C_3 \frac{G_k}{P_k} \right) - C_2 \rho \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (14)$$

Ces équations diffèrent de la forme standard uniquement par les termes sources qui font intervenir, outre les fonctions de dissipation et les constantes, des termes de production/destruction de la turbulence.

Ainsi P_k représente la production d'énergie turbulente par cisaillement et a pour expression :

$$P_k = g_{(ik)} \tau_t^{(ij)} \nabla_{(j)} \overline{V^{(k)}} \text{ dans laquelle}$$

$$\tau_t^{(ij)} = \mu_t \left(g^{(jm)} \nabla_{(m)} \overline{V^{(i)}} + g^{(im)} \nabla_{(m)} \overline{V^{(j)}} \right) - \frac{2}{3} \rho k g^{(ij)}$$

G_k représente l'influence de la stratification thermique sur la production d'énergie turbulente (étirement ou compression des échelles turbulentes). Il s'écrit :

$$G_k = \beta \frac{\mu_t}{\sigma_t} \mathbf{g} \cdot \mathbf{grad} T = \beta \frac{\mu_t}{\sigma_t} g_{(ij)} g^{(i)} g^{(jm)} \frac{\partial T}{\partial x^{(m)}} \quad (15)$$

dans laquelle β est le coefficient de dilatation thermique et \mathbf{g} l'accélération de la pesanteur projetée dans la base locale : $\mathbf{g} = g^{(i)} \mathbf{e}_{(i)}$

$\rho \epsilon$ représente le taux de dissipation de la turbulence par unité de volume.

Les équations (12) à (14) associées au système (11) définissent complètement un écoulement turbulent. Il faut maintenant déterminer les diverses fonctions et constantes du modèle.

3.2.2 Constantes du modèle k- ϵ

Les paramètres du modèle k- ϵ sont issus d'un grand nombre d'expériences et nous donnons dans le tableau 5 leurs valeurs couramment admises. Notons que le nombre de Prandtl turbulent σ_t est le paramètre qui dépend le plus du fluide et des conditions expérimentales : la valeur choisie correspond à celle utilisée pour les métaux liquides tels que l'aluminium.

Tableau 5. Constantes empiriques du modèle k- ϵ

C_μ	C_1	C_2	C_3^*	σ_t	σ_k	σ_ϵ
0.09	1.44	1.92	0.8	1	1	1.3

* $C_3 \approx 1$ pour les écoulements horizontaux

3.3 Interaction fluide-paroi, conditions aux limites

Le modèle k- ϵ présenté suppose une turbulence développée isotrope, il n'est donc pas valable près des parois solides pour lesquelles les effets visqueux peuvent être prédominants. En effet, il est bien connu expérimentalement (voir [Schlichting 69]) que près d'une paroi existent deux zones dans lesquelles la vitesse varie de façon significative. On mesure habituellement l'épaisseur de ces sous-couches à l'aide de la distance à la paroi adimensionnelle y^+ (jouant le rôle

d'un nombre de Reynolds local) définie par : $y^+ = \frac{yU_*}{\nu}$

où y est la distance à la paroi et U_* la vitesse de frottement définie à partir de la contrainte de

cisaillement à la paroi : $\tau_0 = -\rho U_*^2 \frac{U(y) - U(0)}{\|U(y) - U(0)\|}$

Pour $y^+ < 10$ les effets visqueux sont prédominants par rapport à ceux de la turbulence et le profil de vitesse est linéaire :

$$U(y) - U(0) = y \frac{\tau_0}{\rho \nu}$$

Au-delà et jusqu'à $y^+ \approx 100$ le profil est logarithmique selon la loi universelle :

$$\frac{U}{U_*} = \frac{1}{\kappa} \ln(Ey^+) \quad (16)$$

dans laquelle $\kappa = 0.41$ est la constante de Karman et E un facteur de rugosité ($E \approx 9$ pour une paroi lisse).

La modélisation de l'écoulement près d'une paroi nécessite donc un effort supplémentaire. Deux approches sont en général utilisées : les fonctions de paroi et les modèles "bas Reynolds".

3.3.1 Les fonctions de paroi

L'idée de base est d'éviter un calcul explicite dans les régions proches de la paroi en utilisant un traitement global. Dans cette approche on considère que la contrainte de cisaillement totale est donnée par : $\tau_0 = \rho U_*^2$

Cette hypothèse conduit à supprimer les sous-couches visqueuse et logarithmique et à utiliser la loi universelle (16) comme condition à la limite pour la vitesse. Dans cette zone la viscosité turbulente est bien représentée par la relation : $\nu_t = \kappa U_* y$

Les variables k et ε prennent alors les valeurs suivantes : $k = \frac{U_*^2}{\sqrt{C_\mu}}$ $\varepsilon = \frac{U_*^3}{\kappa y}$

Le principal avantage de cette méthode est de ne pas nécessiter un maillage dense près des parois. En contrepartie elle impose au premier nœud de calcul d'être dans la zone logarithmique $10 < y^+ < 100$ ce qui n'est pas toujours possible, la couche logarithmique pouvant être très mince, voire inexistante. De plus ces conditions aux limites forment un système non linéaire qui impose une importante sous-relaxation des équations pour k et ε . Cette méthode donne de bons résultats qualitatifs dans le cas d'écoulements simples mais est inadaptée aux écoulements faiblement recirculants ou en cas de séparation de la couche limite (courbure de la paroi par exemple).

3.3.2 Les modèles "bas Reynolds"

Ces modèles proposent de modifier les coefficients du modèle original afin de prendre en compte les effets de paroi. Ceci est réalisé en multipliant les constantes C_μ , C_1 et C_2 respectivement par les *fonctions de dissipation* f_μ , f_1 et f_2 telles que :

$$0 < f_\mu \leq 1 \quad 1 \leq f_1 \quad 0 < f_2 \leq 1$$

Ces fonctions dépendent de deux nombres de Reynolds locaux : $Re_t = \frac{k^2}{\nu \varepsilon}$ $Re_y = \sqrt{k} \frac{y}{\nu}$

Les conditions aux limites pour k et ε sont alors simplement : $U = U_{\text{paroi}} \quad \frac{\partial \varepsilon}{\partial y} = k = 0$

Le principal avantage de ces modèles réside dans leur simplicité, mais ils posent le problème de la détermination des fonctions de dissipation. En effet, les fonctions f_μ , f_1 et f_2 dépendent du modèle choisi et leur influence concerne essentiellement les transferts d'énergie turbulente aux parois où les effets visqueux sont prédominants. Nous avons examiné trois modèles *a priori* intéressants :

- Le modèle de Jones & Launder [Launder 72] qui est la référence historique. Les fonctions utilisées ont un caractère général et conviennent à la majorité des écoulements.
- Le modèle de Lam & Bremhorst [Lam 81] améliore le précédent au niveau de la turbulence près des parois. Il est surtout utilisé pour les écoulements aérodynamiques qui n'ont pas de transfert thermique aux parois.
- Le dernier modèle est une variante du précédent revu par Davidson et semble mieux adapté au calcul d'écoulements recirculants en convection mixte (voir à ce sujet [Blay 92]).

Les expressions des fonctions de dissipation pour ces différents modèles sont résumées dans le tableau 6. Un autre point critique concerne le nombre Re_y qui fait intervenir la distance à la paroi dont le calcul peut être problématique dans les coins ou les géométries complexes.

Tableau 6. Fonctions de dissipation du modèle k - ε selon plusieurs auteurs

Modèle	f_μ	f_1	f_2
Jones & Launder	$\exp\left(\frac{-2,5}{1 + \frac{R_t}{50}}\right)$	1	$1 - 0,3e^{-R_t^2}$
Lam & Bremhorst	$\frac{1}{2}(1-A)^2 \left[1 + \sqrt{1 + \frac{50}{R_t} \left(1 - e^{(1-A)^2} \right)} \right]$ avec : $A = e^{-0,0119 R_k}$	$1 + \left(\frac{0,05}{f_\mu} \right)^3$	$1 - e^{-R_t^2}$
Lam & Bremhorst revu par Davidson	$\exp\left(\frac{-3,4}{\left(1 + \frac{R_t}{50}\right)^2}\right)$	$1 + \left(\frac{0,14}{f_\mu} \right)^3$	$\begin{pmatrix} 1 - 0,27e^{-R_t^2} \\ 1 - e^{-R_k} \end{pmatrix}$

4 Discrétisation des équations de transport

Nous présentons ici la méthode des volumes finis, la discrétisation des équations de transport et des conditions aux limites. Cette présentation sera l'occasion de montrer quelques aspects concernant la programmation, et plus particulièrement l'apport des langages dits *orientés objets* au calcul scientifique.

4.1 Présentation de la méthode des volumes finis

Dans la méthode des volumes finis, le domaine de résolution est décomposé en éléments de volume dont les faces suivent les lignes de coordonnées. Chacun de ces éléments représente un volume de contrôle associé à une inconnue. Le principe de la méthode des volumes finis consiste à exprimer la conservation du flux de la variable en question à travers les faces de ces volumes de contrôle en utilisant le théorème de la divergence :

$$\int_{\partial\mathcal{V}} \text{div} \varphi \, dv = \oint_{\partial\mathcal{V}} (\varphi \cdot ds) = \oint_{\partial\mathcal{V}} \varphi_s ds \approx \sum_i \varphi_i ds_i \quad (17)$$

Notons que contrairement à la méthode des éléments finis, l'intégration ne fait pas appel à une base polynômiale, mais utilise le théorème de la moyenne en supposant que la valeur de la variable donnée au centre est constante sur tout le volume de contrôle. La solution obtenue est donc continue par morceaux, le principal défaut de cette méthode est donc de conduire à des discontinuités non physiques : une attention toute particulière doit être portée au calcul des flux traversant chaque face des volumes de contrôle. En particulier, les termes de convection $\mathbf{V} \cdot \mathbf{V}$ et $\partial p / \partial x$ doivent être évalués avec précision. Une méthode couramment employée consiste à utiliser un système de grilles décalées — *staggered grids* — pour discrétiser les inconnues de type scalaire (T, p, k, ϵ, \dots) et vectorielles ($\mathbf{V}, \mathbf{F}, \dots$). L'arrangement relatif de ces différentes grilles est schématisé figure 3. Celui-ci présente les avantages numériques suivants :

- Les composantes de la vitesse sont accessibles sans interpolation aux faces des volumes de contrôle scalaires pour le calcul des flux de convection.
- La pression est localisée au milieu de deux faces opposées d'un même volume de contrôle pour la vitesse : les gradients de pression (calculés aux noeuds de vitesse) sont précis à l'ordre deux.

Afin de simplifier l'écriture, nous utiliserons la notation de la rose des vents pour localiser les

voisins d'un noeud particulier¹ (majuscules pour les noeuds de la même grille, minuscules pour les facettes).

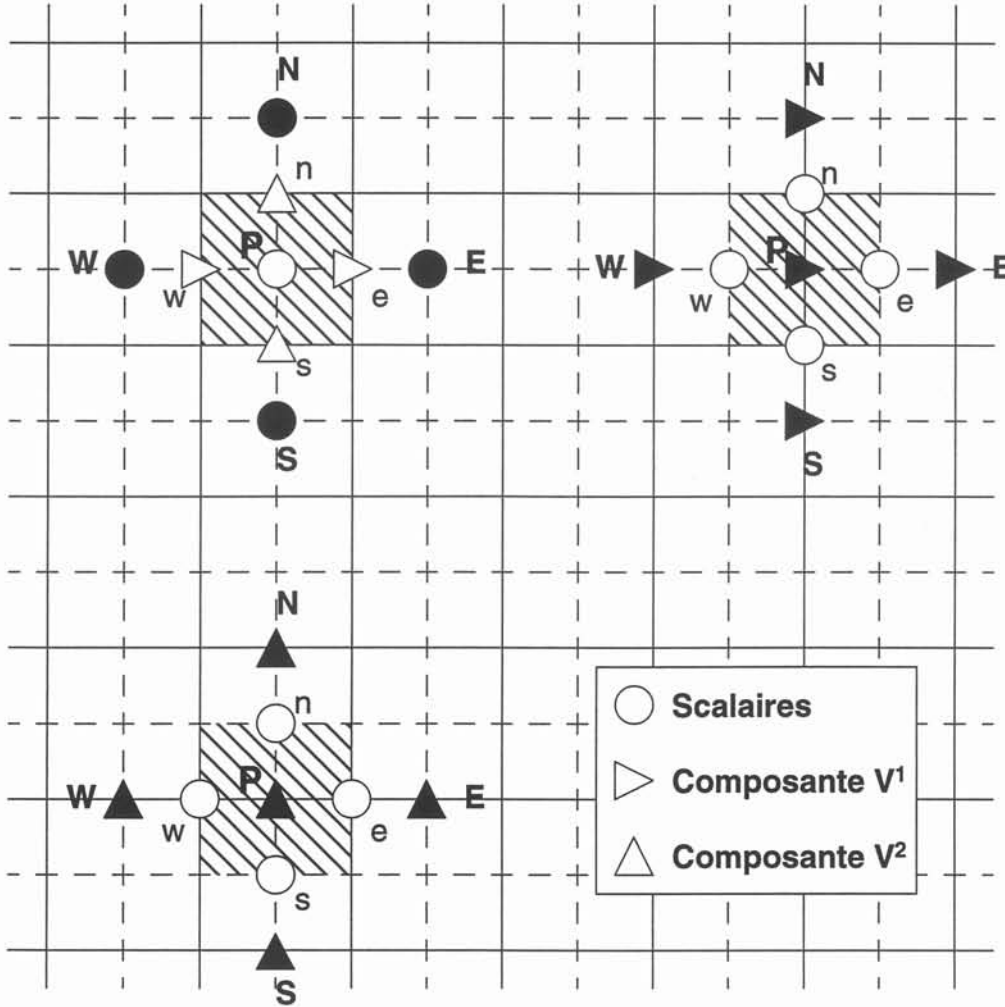


Figure 3. Grilles décalées dans l'espace curviligne et notations de voisinage

Compte tenu de (17) les équations de transport prennent alors la forme générale suivante, écrite pour chaque volume de contrôle :

$$\frac{1}{\delta t} \int_t \left[\int_{\mathfrak{V}} \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial t} (\sqrt{g} \rho \psi) dv \right] dt + \sum_i \left[\int_{S_i} \left(\rho V^{(j)} \psi - h_{\psi} g^{(jm)} \frac{\partial \psi}{\partial x^{(m)}} \right)_i ds_i \right] = \int_{\mathfrak{V}} S_{\psi} dv \quad (18)$$

Dans cette équation nous reconnaissons les termes instationnaire, de convection, de diffusion et les sources. Ces différents éléments, que nous appellerons intégrants, font intervenir une intégration et une opération de dérivation pour lesquelles il faut définir une méthode de calcul.

¹ En 3 dimensions il convient d'ajouter les noeuds F (front) et B (back)

En général, l'intégration est donnée par le théorème de la valeur centrale : $\int_S a \cdot ds = a_P \cdot S$

Pour les différentes dérivations nous utiliserons une décomposition en série de Taylor tronquée à un certain ordre, et faisant intervenir, comme dans le cas des différences finies, la valeur de la variable aux noeuds adjacents. On obtient ainsi pour chaque volume de contrôle P une équation pour une variable principale ψ de la forme :

$$a_P \psi_P + \sum_i a_i \psi_i = b \quad a_P > 0 \quad a_i \leq 0 \quad b \geq 0^1 \quad (19)$$

Ces équations forment un système matriciel $AX = B$. La matrice A possède la propriété remarquable d'être creuse et diagonale par blocs, il est alors intéressant d'utiliser une méthode de résolution qui conserve cette structure afin d'économiser la place de stockage des éléments nuls. Parmi celles existantes — une étude exhaustive des méthodes d'inversion de matrices en mécanique des fluides peut être trouvée dans [Wesseling 91] et une implémentation pratique des plus courantes d'entre elles dans [Press 92] — nous avons choisi la méthode itérative de Gauss-Siedel par bloc (TDMA) relaxée avec balayage alterné dans chaque direction.

Nous allons maintenant décrire la discrétisation associée à chaque intégrant de l'équation (18).

4.2 Discrétisation de l'équation de transport

Les différents coefficients a_i de l'équation (19) sont en fait la somme des contributions \tilde{a}_i de chaque intégrant : $a_i = \sum_n \tilde{a}_i(n)$. Ce sont ces contributions que nous allons expliciter.

4.2.1 Terme instationnaire

L'intégration entre les temps t et $t+\Delta t$ s'écrit au noeud P :

$$\frac{1}{\delta t} \int_t^{t+\Delta t} \left[\int_{\vartheta} \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial t} (\sqrt{g} \rho \psi) dv \right] dt \equiv \frac{1}{\Delta t} [(\rho \vartheta \psi)_P^n - (\rho \vartheta \psi)_P^o] \quad \text{où } (...)^\circ \text{ représente les valeurs à}$$

l'instant t et $(...)^n$ celles à l'instant $t+\Delta t$, ϑ le volume de la maille.

$$\text{L'identification avec l'équation (19) est immédiate : } \tilde{a}_P = \frac{1}{\Delta t} (\rho \vartheta)_P^n \quad \tilde{b} = \frac{1}{\Delta t} (\rho \vartheta \psi)_P^o$$

Notons que cette discrétisation implique de conserver en mémoire les anciennes valeurs de ψ .

¹ Pour une puissance fournie au système.

4.2.2 Terme de diffusion

Diffusion d'une variable scalaire

La divergence du vecteur flux s'écrit sous la forme intégrale suivante :

$$\sum_m \left[\int_{S_m} \left(-h_\psi g^{(ij)} \frac{\partial \psi}{\partial x^{(j)}} \right) ds \right] \equiv \sum_m \left[-h_\psi g^{(ij)} \frac{\Delta \psi}{\Delta x^{(j)}} n_{(i)} ds \right]_m$$

Dans cette formule nous notons :

- $m = \{e, w, n, s, f, b\}$ les facettes du volume de contrôle
- $n_{(i)}$ la normale extérieure de la facette
- $g^{(ij)}$ le tenseur métrique évalué au centre de la facette m
- $\Delta x^{(j)}$ l'élément de longueur le long de la ligne de coordonnée j centré sur m
- $\Delta \psi$ une estimation du gradient en m
- ds la surface de la facette m

Habituellement, en coordonnées orthogonales le tenseur métrique est diagonal et seule la composante du gradient normale à la facette intervient, mais en non orthogonal il faut nécessairement calculer le vecteur complet pour chaque facette. Nous allons détailler le calcul pour la facette e en nous aidant des indications de la figure 4.

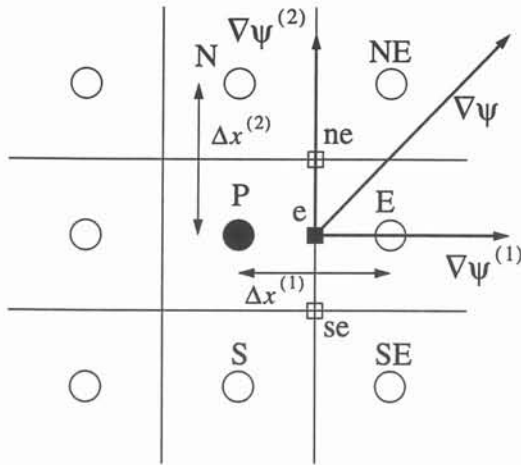


Figure 4. Notation et orientation des éléments géométriques pour le calcul du gradient

Nous pouvons estimer les composantes du gradient par les relations suivantes :

$$\left. \frac{\partial \psi}{\partial x^{(1)}} \right|_e \approx \frac{\psi_E - \psi_P}{\Delta x^{(1)}|_e} \quad \left. \frac{\partial \psi}{\partial x^{(2)}} \right|_e \approx \frac{\psi_{ne} - \psi_{se}}{\Delta x^{(2)}|_e}$$

La composante tangentielle nécessite une estimation par interpolation avec les noeuds principaux :

$$\left. \begin{aligned} \psi_{ne} &\approx \frac{1}{4} (\psi_P + \psi_E + \psi_{NE} + \psi_N) \\ \psi_{se} &\approx \frac{1}{4} (\psi_P + \psi_S + \psi_{SE} + \psi_E) \end{aligned} \right\} \Rightarrow \frac{\partial \psi}{\partial x^{(2)}} \Big|_e \approx \frac{1}{4} \frac{\psi_{NE} - \psi_{SE} + \psi_N - \psi_S}{\Delta x^{(2)} \Big|_e}$$

Nous devons calculer le produit des différents éléments :

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial \psi}{\partial x^{(1)}} \Big|_e \\ \frac{\partial \psi}{\partial x^{(2)}} \Big|_e \end{bmatrix} = -h_\psi \begin{bmatrix} g^{(11)} & g^{(12)} \\ g^{(21)} & g^{(22)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\psi_E - \psi_P}{\Delta x^{(1)} \Big|_e} \\ \frac{1}{4} \frac{\psi_{NE} - \psi_{SE} + \psi_N - \psi_S}{\Delta x^{(2)} \Big|_e} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} ds_e$$

et finalement :

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial \psi}{\partial x^{(1)}} \Big|_e \\ \frac{\partial \psi}{\partial x^{(2)}} \Big|_e \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -h_\psi \left(g^{(11)} \frac{\psi_E - \psi_P}{\Delta x^{(1)} \Big|_e} + g^{(12)} \frac{1}{4} \frac{\psi_{NE} - \psi_{SE} + \psi_N - \psi_S}{\Delta x^{(2)} \Big|_e} \right) ds_e \\ 0 \end{bmatrix}$$

L'identification des coefficients donne :

$$\tilde{a}_P = -\tilde{a}_E = h_\psi g^{(11)} \frac{ds_e}{\Delta x^{(1)} \Big|_e} \quad \tilde{a}_S = -\tilde{a}_N = \frac{1}{4} h_\psi g^{(12)} \frac{ds_e}{\Delta x^{(2)} \Big|_e} \quad \tilde{b} = -\frac{1}{4} h_\psi g^{(12)} \frac{\psi_{NE} - \psi_{SE}}{\Delta x^{(2)} \Big|_e} ds_e$$

Des formules identiques peuvent être obtenues pour les autres facettes.

Remarquons que la non orthogonalité a deux conséquences :

- Les coefficients ne sont pas tous du même signe et cela peut pénaliser la procédure de résolution du système linéaire s'il ne vérifie plus le critère de Scarborough. La discrétisation ne suit plus les règles proposées dans [Patankar 80].
- Une équation qui était linéaire à coefficients constants ne l'est plus en raison du terme source additionnel fonction de la variable discrétisée.

Divergence du tenseur des contraintes

Dans l'équation de quantité de mouvement le terme de diffusion fait intervenir les dérivées covariantes de la vitesse :

$$\tau^{(ij)} = \mu (D^{(ij)} + D^{(ji)}) \quad \text{où} \quad D^{(ij)} = \nabla_{(i)} V^{(j)} = \frac{\partial V^{(j)}}{\partial x^{(i)}} + \Gamma_{(mi)}^{(j)} V^{(m)}$$

La divergence du tenseur des contraintes est alors discrétisée de la manière suivante, par exemple pour la composante $V^{(1)}$:

$$\int_{\mathfrak{V}} \frac{\Delta}{\Delta x^{(j)}} \tau^{(1j)} dv \approx (\tau^{(11)} ds)_e - (\tau^{(11)} ds)_w + (\tau^{(12)} ds)_n - (\tau^{(12)} ds)_s$$

Rappelons que :

$$\begin{aligned} \tau^{(11)} &= 2\mu (g^{(11)} \nabla_{(1)} V^{(1)} + g^{(12)} \nabla_{(2)} V^{(1)}) \\ \tau^{(22)} &= 2\mu (g^{(22)} \nabla_{(2)} V^{(2)} + g^{(21)} \nabla_{(1)} V^{(2)}) \\ \tau^{(12)} &= \tau^{(21)} = \mu (g^{(11)} \nabla_{(1)} V^{(2)} + g^{(12)} \nabla_{(2)} V^{(2)} + g^{(22)} \nabla_{(2)} V^{(1)} + g^{(21)} \nabla_{(1)} V^{(1)}) \end{aligned}$$

Développons l'expression de $\tau_e^{(11)}$:

$$\tau_e^{(11)} = 2\mu \left[g^{(11)} \left(\frac{\partial V^{(1)}}{\partial x^{(1)}} + \Gamma_{(11)}^{(1)} V^{(1)} + \Gamma_{(12)}^{(1)} V^{(2)} \right) + g^{(12)} \left(\frac{\partial V^{(1)}}{\partial x^{(2)}} + \Gamma_{(12)}^{(1)} V^{(1)} + \Gamma_{(22)}^{(1)} V^{(2)} \right) \right]_e$$

De même que précédemment, il faut calculer le gradient de vitesse complet :

$$\left. \frac{\partial V^{(1)}}{\partial x^{(1)}} \right|_e \approx \frac{V_E^{(1)} - V_P^{(1)}}{\Delta x^{(1)}|_e} \quad \left. \frac{\partial V^{(1)}}{\partial x^{(2)}} \right|_e \approx \frac{V_{ne}^{(1)} - V_{se}^{(1)}}{\Delta x^{(2)}|_e} \text{ ainsi que } V^{(1)} \text{ et } V^{(2)} \text{ sur la facette } e.$$

Pour la seconde composante, on applique simplement une interpolation linéaire :

$$V_e^{(2)} \approx \frac{1}{2} (V_{ne}^{(2)} + V_{se}^{(2)}) \text{ les indices } e, ne \text{ et } se \text{ étant relatifs à la grille de } V^{(1)}.$$

La discrétisation de l'autre composante nécessite un peu de réflexion. Nous pouvons utiliser une formule similaire à la précédente, auquel cas nous avons $V_e^{(1)} = \frac{1}{2} (V_E^{(1)} + V_P^{(1)})$ et le

$$\text{terme complet issu de } \tau^{(11)} \text{ devient : } 2\mu (g^{(11)} \Gamma_{(11)}^{(1)} + g^{(12)} \Gamma_{(12)}^{(1)}) V_e^{(1)} = \alpha_e (V_E^{(1)} + V_P^{(1)})$$

Le coefficient α_e peut être négatif et donc diminuer la valeur de a_p dans l'équation discrétisée, ce qui pénalise la procédure de résolution en diminuant son caractère "à diagonale dominante". Il convient donc de considérer la discrétisation suivante de la contribution des termes en $V^{(1)}_e$:

$$\tilde{b} = -\alpha_e (V_E^{(1)} + V_P^{(1)}) \quad \text{si } \alpha_e \leq 0 \quad \tilde{a}_p = \alpha_e \quad \tilde{b} = -\alpha_e V_E^{(1)} \quad \text{si } \alpha_e > 0$$

Notons que ce serait une erreur de faire intervenir un schéma de convection (tel que Upwind) pour calculer $V^{(1)}_e$ car il s'agit ici de la partie diffusion de l'équation de transport : $V^{(1)}_e$ n'a

donc aucun rapport avec une vitesse de convection. Ce problème est développé au paragraphe suivant.

4.2.3 Terme de convection

Le terme de convection de l'équation intégrale s'écrit, aussi bien pour un scalaire que pour une composante de vecteur :

$$C = \sum_m \int_{S_m} (\rho V^{(j)} \psi n_{(i)}) ds_m$$

Cette équation développée fait apparaître les flux convectés à travers chaque face :

$$C = \int_{S_e} (\rho V^{(1)} \psi)_e ds_e - \int_{S_w} (\rho V^{(1)} \psi)_w ds_w + \int_{S_n} (\rho V^{(2)} \psi)_n ds_n - \int_{S_s} (\rho V^{(2)} \psi)_s ds_s$$

La variable convectée ψ_m doit être discrétisée selon une méthode appelée schéma de convection, chacune ayant des avantages et des inconvénients. Nous allons en présenter quelques unes.

Schéma aux différences centrées

On suppose que ψ varie linéairement entre chaque noeud et on pose que ψ_m est la valeur moyenne :

$$\psi_m \approx \frac{1}{2} (\psi_P + \psi_M)$$

Cette relation conduit à une discrétisation de la forme :

$$\tilde{a}_m = \frac{\varepsilon}{2} \rho_m V^{(1 \text{ ou } 2)} ds_m, \varepsilon = \pm 1 \quad \tilde{a}_P = \sum_m \tilde{a}_m$$

Ces contributions à l'équation finale peuvent conduire à des solutions non physiques ou empêcher la convergence de la méthode de résolution dans les cas suivants :

- Ecoulement à grand nombre de Reynolds.
- $a_P \rightarrow 0$ pour les fluides à faible nombre de Prandtl.

Schéma amont (upwind)

Ce schéma est basé sur le fait que l'information vient toujours de l'amont. On calcule ψ_m de la

façon suivante :

$$\begin{aligned} \psi_m &= \psi_P & \text{si } F_m \geq 0 \\ \psi_m &= \psi_M & \text{si } F_m < 0 \end{aligned} \quad \text{avec : } F_m = (\rho V^{(1 \text{ ou } 2)} ds)_m$$

Les inconvénients liés au schéma aux différences centrées disparaissent, mais au prix d'une perte de précision : son ordre faible lui donne un comportement lissant en absorbant les forts gradients. De plus on peut montrer [Revel 93] qu'il fait apparaître de la diffusion numérique.

Schémas du premier ordre : formulation générale

Patankar propose dans [Patankar 80] une généralisation des schémas précédents en introduisant une fonction $A(Pe)$ où Pe est le nombre de Peclet local défini par $Pe_m = \frac{F_m}{D_m}$ dans

laquelle F_m sont les coefficients du terme de convection et D_m ceux de diffusion.

Nous reportons ici l'expression finale des coefficients de l'équation discrétisée (coefficients de diffusion + convection) :

$$a_m = D_m A(|Pe|_m) + \max(-\varepsilon_m F_m, 0) \quad a_P = \sum_m (a_m + \varepsilon_m F_m)$$

$$\text{avec : } m \in \{e, n, f\} \Rightarrow \varepsilon_m = +1 \quad m \in \{w, s, b\} \Rightarrow \varepsilon_m = -1$$

Le tableau 7 résume l'expression de $A(Pe)$ pour quelques schémas.

Tableau 7. Expression de $A(Pe)$ pour différents schémas de convection d'après [Patankar 80]

Schéma	$A(Pe)$
Différences centrées	$1 - \frac{ Pe }{2}$
Amont	1
Hybride	$\max\left(0, \left[1 - \frac{ Pe }{2}\right]\right)$
Puissance	$\max\left(0, \left[1 - \frac{ Pe }{10}\right]^5\right)$
Exponentiel (exact)	$\frac{ Pe }{e^{ Pe } - 1}$

Schémas d'ordre plus élevé

Outre ces schémas du premier ordre, il existe une famille dont l'ordre est plus élevé tels que QUICK [Leonard 79] et des variantes plus stables comme SMART (voir [Gaskell 88]).

Nous avons entrepris une étude de cette famille dans le cadre du travail de D.E.A de

Jean-François Revel [Revel 93] dont les conclusions mettent en évidence une meilleure réduction de la diffusion numérique et une bonne capacité à représenter de forts gradients.

Ces schémas sont basés sur une interpolation quadratique à trois points décalés amont. Une interpolation du second ordre étant à l'origine d'oscillations non physiques, ces schémas sont la plupart du temps pondérés par un schéma du premier ordre visant à les stabiliser et à diminuer les dépassements — *overshoot* — de la variable convectée.

Plusieurs fonctions de pondération *ad hoc* ont été proposées faisant en général intervenir une quantité adimensionnelle. Plus récemment, T. Hayase a proposé dans [Hayase 92] une formulation plus générale ainsi qu'une méthode permettant d'obtenir un schéma précis, stable et présentant peu d'effets de dépassement.

Nous reprenons ici l'idée générale de son article, les notations utilisées supposent, sans perte de généralité, un problème unidimensionnel.

Il remarque en premier lieu que tous les schémas du second ordre peuvent se ramener à la formulation suivante :

$$\begin{aligned} u_e > 0, u_w > 0 : \quad & \phi_e = a_1\phi_{i-1} + a_2\phi_i + a_3\phi_{i+1} + S_e^+ \\ & \phi_w = b_1\phi_{i-1} + b_2\phi_i + b_3\phi_{i+1} + S_w^+ \\ u_e < 0, u_w < 0 : \quad & \phi_e = b_3\phi_{i-1} + b_2\phi_i + b_1\phi_{i+1} + S_e^- \\ & \phi_w = a_3\phi_{i-1} + a_2\phi_i + a_1\phi_{i+1} + S_w^- \end{aligned}$$

dans laquelle les termes S sont des sources s'écrivant :

$$\begin{aligned} S_e^+ &= \left(-\frac{1}{8} - a_1\right)\phi_{i-1} + \left(\frac{3}{4} - a_2\right)\phi_i + \left(\frac{3}{8} - a_3\right)\phi_{i+1} \\ S_w^+ &= -\frac{1}{8}\phi_{i-2} + \left(\frac{3}{4} - b_1\right)\phi_{i-1} + \left(\frac{3}{8} - b_2\right)\phi_i - b_3\phi_{i+1} \\ S_e^- &= -\frac{1}{8}\phi_{i+2} + \left(\frac{3}{4} - b_1\right)\phi_{i+1} + \left(\frac{3}{8} - b_2\right)\phi_i - b_3\phi_{i-1} \\ S_w^- &= \left(-\frac{1}{8} - a_1\right)\phi_{i+1} + \left(\frac{3}{4} - a_2\right)\phi_i + \left(\frac{3}{8} - a_3\right)\phi_{i-1} \end{aligned}$$

Les valeurs des coefficients a et b sont reportées tableau 8 pour quelques schémas et celui proposé par Hayase. L'auteur remarque à juste titre qu'en l'absence de termes sources dans l'équation de convection/diffusion, la plupart de ces schémas ne respectent pas les règles d'une "bonne" discrétisation. Il propose donc des relations algébriques entre les coefficients a et b afin que les conditions suivantes soient vérifiées :

- R1 : Identité des flux entrant et sortant par une face commune à deux nœuds adjacents : $(\phi_e)_i = (\phi_w)_{i+1}$
- R2 : Coefficients de l'équation discrétisée du même signe.

- R3 : Linéarisation du terme source respectant la contrainte $Sp < 0$.

- R4 : $A_P = \sum_m |A_m|$

Ses calculs l'amène à proposer les valeurs du tableau 8 comme une bonne discrétisation pour un schéma du second ordre, les expressions finales sont alors :

$$\begin{aligned} u_e > 0, u_w > 0 : \\ \phi_e &= \phi_i + \frac{1}{8} (-\phi_{i-1} - 2\phi_i + 3\phi_{i+1}) \\ \phi_w &= \phi_{i-1} + \frac{1}{8} (-\phi_{i-2} - 2\phi_{i-1} + 3\phi_i) \\ u_e < 0, u_w < 0 : \\ \phi_e &= \phi_{i+1} + \frac{1}{8} (3\phi_i - 2\phi_{i+1} - \phi_{i+2}) \\ \phi_w &= \phi_i + \frac{1}{8} (3\phi_{i-1} - 2\phi_i - \phi_{i+1}) \end{aligned}$$

Les termes entre parenthèses correspondent aux sources. Rappelons que les coefficients de convection de l'équation discrétisée finale sont toujours de la forme : $A_m = \varepsilon_m \rho_m U_m \phi_m ds_m$

Tableau 8. Valeur des coefficients a et b pour différents schémas type QUICK et niveau de satisfaction des règles R1 à R4

	Coefficients						Règles*			
	a1	a2	a3	b1	b2	b3	R1	R2	R3	R4
Leschziner (1980)	-1/8	6/8	3/8	6/8	3/8	0	P	P	O	N
Han <i>et al.</i> (1981)	0	6/8	4/8	4/8	3/8	0	N	P	O	N
Pollard & Siu (1982)	-1/8	7/8	-6/8	6/8	-6/8	0	N	O	O	O
Freitas <i>et al.</i> (1985)	-1/8	6/8	-1/8	6/8	3/8	0	N	O	O	N
Hayase (1992)	0	1	0	1	0	0	O	O	O	O

* Degré de satisfaction : P (partiel), O (oui), N (non)

T. Hayase suggère d'utiliser avec ce schéma des conditions aux limites du deuxième ou troisième ordre. Mais nous avons constaté que, dans le cas de l'effet thermocapillaire, le couplage entre champ de température et de vitesse en surface provoque des dépassements néfastes à la précision et ralenti considérablement la convergence (apparition d'oscillations dans le résidu de masse et de la température). Le moyen le plus efficace pour supprimer ces problèmes a été d'appliquer un schéma du premier ordre tel que UPWIND ou HYBRID pour les nœuds à la limite. Nous proposons à l'annexe C des exemples permettant de juger de l'efficacité des différents schémas vis-à-vis de la diffusion numérique et de la précision.

4.2.4 Termes sources

Nous distinguons trois types de termes sources :

- Les termes sources “physiques” tels que les forces de volumes ou de production de la turbulence
- Les sources d’origine “géométrique” provenant des termes de courbure dans les équations de quantité de mouvement
- Les termes “numériques” issus de la discrétisation des différents opérateurs

Dans tous les cas il faut tenir compte d’une éventuelle linéarisation qui conduit à une discrétisation de la forme $S_\psi = S_C + S_P \cdot \psi_P$ avec la contrainte $S_P \leq 0$ afin de respecter le caractère “à diagonale dominante” du système linéaire.

Termes sources “numériques”

Nous avons déjà rencontré de telles sources aux paragraphes précédents. Elles apparaissent principalement dans l’opérateur de dérivation avec un maillage non orthogonal. On ne peut malheureusement ni les supprimer, ni contrôler leur signe, ce qui implique que la présence de non orthogonalités dégrade les performances globales de la procédure de résolution.

Termes de courbure

Les équations de quantité de mouvement contiennent les termes sources correspondant au tenseur des contraintes :

$\int_{\vartheta} \Gamma_{(mj)}^{(i)} \tau^{(mj)} \vartheta \Big|_P \approx \Gamma_{(mj)}^{(i)} \tau^{(mj)} \vartheta \Big|_P$. On écrira par exemple :

$$\tau_p^{(11)} = 2\mu \left[g^{(11)} \left(\frac{\partial V^{(1)}}{\partial x^{(1)}} + \Gamma_{(11)}^{(1)} V^{(1)} + \Gamma_{(11)}^{(1)} V^{(1)} \right) + g^{(12)} \left(\frac{\partial V^{(1)}}{\partial x^{(2)}} + \Gamma_{(12)}^{(1)} V^{(1)} + \Gamma_{(22)}^{(1)} V^{(1)} \right) \right]_P$$

Du fait des grilles décalées, les termes de dérivation ne s’expriment pas simplement en fonction de l’inconnue principale, mais à l’aide de valeurs interpolées :

$$\frac{\partial V^{(1)}}{\partial x^{(1)}} \Big|_P \approx \frac{V_e^{(1)} - V_w^{(1)}}{\delta x_p^{(1)}} \quad \frac{\partial V^{(1)}}{\partial x^{(2)}} \Big|_P \approx \frac{V_n^{(1)} - V_s^{(1)}}{\delta x_p^{(2)}}$$

Il est possible d’écrire une linéarisation pour $\tau_p^{(11)}$ en regroupant les termes contenant $V^{(1)}$, mais l’expérience montre que le terme S_P ainsi obtenu reste petit (la viscosité et la courbure sont en général faibles) et vérifie rarement la condition $S_P \leq 0$, nous avons donc choisi de ne pas linéariser les termes sources correspondant au tenseur des contraintes. Par contre, les équations de quantité de mouvement contiennent aussi une contribution due au terme de

$$\text{convection : } \int_{\vartheta} -\Gamma_{(mj)}^{(i)} [\rho V^{(m)} V^{(j)}] \approx -\Gamma_{(mj)}^{(i)} [\rho V^{(m)} V^{(j)}] \vartheta|_P$$

Développé *in extenso*, ce terme amène quatre contributions (par exemple pour $V^{(1)}$) :

$$\begin{aligned} S^{11} &= -\Gamma_{(11)}^{(1)} \rho V_P^{(1)} V_P^{(1)} \vartheta_P & S^{21} &= -\Gamma_{(21)}^{(1)} \rho V_P^{(2)} V_P^{(1)} \vartheta_P \\ S^{12} &= -\Gamma_{(12)}^{(1)} \rho V_P^{(1)} V_P^{(2)} \vartheta_P & S^{22} &= -\Gamma_{(22)}^{(1)} \rho V_P^{(2)} V_P^{(2)} \vartheta_P \end{aligned}$$

Il est alors intéressant de linéariser les termes contenant $V^{(1)}$:

$$S^{1j} = [-\Gamma_{(1j)}^{(1)} \rho V_P^{(j)} \vartheta_P] V_P^{(1)} \quad S^{21} = [-\Gamma_{(21)}^{(1)} \rho V_P^{(2)} \vartheta_P] V_P^{(1)}$$

Si le terme entre crochets est négatif, il est ajouté à S_P , sinon l'ensemble est ajouté à S_C .

Termes sources des équations de la turbulence

Les équations pour k et ε étant couplées et non linéaires, il faut apporter un soin particulier à la linéarisation de leurs termes sources.

- Pour l'énergie cinétique de la turbulence :

$$S_k = \int_{\vartheta} (P_k - \rho \varepsilon) dv \approx (P_k \vartheta)_P - \left(\frac{\rho^2 C_\mu k \vartheta}{\mu_t} \right)_P k_P = S_{kC} + S_{kP} k_P$$

- Pour le taux de dissipation :

$$S_\varepsilon = \int_{\vartheta} \left(C_{\varepsilon 1} P_k \frac{\varepsilon}{k} - C_{\varepsilon 2} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} \right) dv \approx \left(C_{\varepsilon 1} P_k \frac{\varepsilon}{k} \right)_P - \left(C_{\varepsilon 2} \rho \frac{\varepsilon}{k} \right)_P \varepsilon_P = S_{\varepsilon C} + S_{\varepsilon P} \varepsilon_P$$

Cette linéarisation donne en général de bons résultats, surtout si elle est associée — dans le cas d'écoulements fortement turbulents — à une sous-relaxation de la viscosité turbulente :

$$\mu_t|_P = (1 - \alpha_\mu) \mu_t|_P^0 + \alpha_\mu \mu_t, \quad \mu_t|_P^0 \text{ étant la viscosité turbulente au point P à l'itération précédente}$$

En présence d'un champ de température non uniforme, il faut tenir compte du terme G_k de production / destruction de k due à l'action des forces d'accélération de la pesanteur (équation (15) page 23).

Termes sources physiques

Nous n'envisageons ici que le cas des forces d'Archimède pour un fluide dont la densité est

fonction de la température : $\rho(T) = \rho_0 [1 - \beta(T - T_0)]$ dans laquelle ρ_0 est la densité à la température T_0 et β le coefficient d'expansion thermique du fluide.

Selon l'hypothèse de Boussinesq, les forces de volume correspondantes se décomposent en une partie variable et une partie constante : $F_g = F_g^0 + F_v = \rho_0 g - \rho_0 \beta (T - T_0) g$

Le premier terme est intégré à la pression : $p^* = p + \rho_0 \|g\| z$ tandis que la partie variable est ajoutée aux équations de quantité de mouvement : $S_{v^{(i)}}|_P = -\rho_0 \beta (T - T_0) g^{(i)} \vartheta|_P$

Partout ailleurs dans les équations, la masse volumique est supposée constante égale à ρ_0 .

4.3 Discrétisation des conditions aux limites

Bien que les conditions aux limites fassent appel à des formes mathématiques similaires (en général des conditions de type Neumann ou Dirichlet) pour toutes les variables principales, leurs discrétisations doivent tenir compte de la topologie de la grille sur laquelle elles s'appliquent. Nous allons donc présenter séparément les conditions hydrauliques et celles sur les scalaires. Nous noterons pour simplifier l'écriture α et β les directions normale et tangentielle à la facette où s'applique la condition à la limite et avec un indice b les quantités connues sur cette frontière.

4.3.1 Conditions aux limites pour les scalaires

Les nœuds principaux des scalaires ne se situant pas sur les frontières, il faut déterminer une relation entre la valeur au nœud principal et celui sur la paroi tenant compte du profil supposé de la variable entre ces nœuds. Nous allons en présenter quelques unes relatives au problème physique traité, à savoir l'effet thermocapillaire créé par une tâche chaude en surface.

Condition de type Neumann (flux imposé)

Dans ce cas particulier la discrétisation est immédiate puisque dans la méthode des volumes finis, après intégration et application du théorème de la divergence, ce sont les flux à travers les facettes du volume de contrôle qui interviennent dans l'équation discrétisée. On obtient donc pour la facette concernée : $\tilde{s}_U = \varphi_{Cb} \Delta s$ $\tilde{s}_P = \varphi_{Pb} \Delta s$ avec $\varphi = \varphi_{Cb} + \varphi_{Pb} \psi_P$ le flux imposé linéarisé. Nous donnons dans le tableau 9 quelques expressions de φ .

Condition de type Dirichlet (variable imposée)

Cette condition est transformée en une condition de flux : $h_\psi g^{(\alpha\alpha)} \frac{\psi_b - \psi_P}{\Delta x^{(\alpha)}} = \varphi_{Cb} \Delta s$

La discrétisation conduit donc à : $\tilde{a}_P = h$ $\tilde{s}_U = h \psi_b$ avec $h = h_\psi g^{(\alpha\alpha)} \frac{\Delta s}{\Delta x^{(\alpha)}}$

Tableau 9. Expression de quelques flux thermiques

Phénomène physique	Φ_C	Φ_P
<i>Paroi adiabatique</i>	0	0
<i>Faisceau électronique (flux gaussien)</i> P : puissance efficace a : rayon D : dimension de l'espace (3 ou 2) x : distance au point d'impact	$\frac{P}{(a\pi^{1/2})^{D-1}} \cdot e^{-\frac{x^2}{a^2}}$	0
<i>Pertes radiatives : $\varepsilon\sigma (T_{amb}^4 - T_{paroi}^4)$</i> ε : émissivité $h = \varepsilon\sigma (T_{amb}^3 + T_{amb}^2 T + T_{amb} T_P^2 + T_P^3)$	hT_{amb}	-h
<i>Flux d'évaporation (loi de Langmuir) :</i> T^* : température en surface $P_{sat}(T^*)$: pression de vapeur saturante $\Delta H_v(T^*) = L_v(T^*) + (C_{P_{liq}} - C_{P_{vap}})(T_b - T^*)$ M : masse molaire	$\frac{P_{sat}(T^*)}{\sqrt{2\pi RMT^*}} \Delta H_v(T^*)$	0

4.3.2 Conditions aux limites pour la vitesse

Il est nécessaire de distinguer les conditions qui concernent les composantes tangentielles de celles qui s'appliquent à la composante normale à la paroi du fait des grilles décalées. Nous résumons dans le tableau 10 les différentes expressions utilisées.

Tableau 10. Discrétisation des conditions aux limites hydrauliques

Type de condition	Composante normale	Composantes tangentielles
<i>Vitesse imposée</i>	$s_U = V_b^{(\alpha)} \quad a_P = 1$ Les autres coefficients sont mis à 0	$\tilde{a}_P = h \quad \tilde{s}_U = hV_b^{(\beta)}$ avec $h = \mu g^{(\beta\beta)} \Delta s / \Delta x^{(\alpha)}$
<i>Condition de symétrie</i> (lignes de courant normales à la facette)	$a_P = -a_{-\alpha} = 1^*$ Les autres coefficients sont mis à 0	Pas de modification des coefficients
<i>Condition de symétrie</i> (lignes de courant tangentes à la facette)	Pas de modification des coefficients	$a_P = 1 \quad s_U = V_{-\alpha}^{(\beta)}$
<i>Effet marangoni</i>	$V^{(\alpha)} = 0$	$\tilde{s}_U = \sigma_T \frac{\Delta T}{\Delta x^{(\beta)}} \Delta s$

* On note $a_{-\alpha}$ le coefficient correspondant au noeud symétrique par rapport à la paroi dans la direction α

4.4 Quelques aspects de la programmation objet

Le calcul tensoriel utilisé pour la mise en équations est une écriture synthétique possédant quelques règles algébriques simples mais dont la mise en œuvre sur un calculateur peut être longue, fastidieuse et source d'erreurs difficiles à détecter. Par exemple, le calcul des termes sources des équations de quantité de mouvement et du tenseur des contraintes représente environ 250 termes et il est difficile de connaître *a priori* quels sont ceux qui contribuent le plus aux transferts de quantité de mouvement.

Une autre difficulté vient du fait que les différents opérateurs sont discrétisés, il faut donc effectuer les calculs pour chaque contribution aux coefficients a_p , a_i , s_U : on conçoit alors que la clarté mathématique initiale soit perdue au moment de la programmation.

Nous avons donc cherché un moyen de retrouver cette simplicité en utilisant un langage dit orienté objet, le C++ dans notre cas. En effet ce langage permet une description homogène des données et des actions les concernant et ce concept, associé à d'autres fonctionnalités, nous a permis d'écrire une bibliothèque de calcul tensoriel assurant une correspondance simple et directe avec l'écriture mathématique.

4.4.1 Terminologie du C++ et notions fondamentales

Notre objectif n'étant pas un cours sur la programmation objet, nous reportons le lecteur intéressé par une description approfondie des éléments présentés aux ouvrages de S.C. Dewhurst [Dewhurst 90] et B. Stroustrup [Stroustrup 89], nous nous contenterons d'explicitier ici les termes et principes que nous utiliserons.

En C++ on désigne par *objet* l'ensemble des données et des fonctions les manipulant. Un objet appartient à une *classe* qui en définit le type (au sens informatique). Un objet particulier (une "variable") de cette classe est appelé une *instance*. Les fonctions ou actions que l'on peut effectuer sur un objet font partie de celui-ci et sont appelées des *fonctions membres*. Celles-ci se répartissent en plusieurs catégories dont nous citerons les plus importantes :

- Les *constructeurs* : ces fonctions sont appelées implicitement à la création d'une instance et lors d'une affectation.
- Les *opérateurs* : ce sont certainement les fonctions les plus intéressantes dans notre cas car ils permettent de redéfinir les principaux opérateurs algébriques (+, *, /, etc). Ils sont aussi utilisés pour les opérations de conversion d'un objet en un autre.
- Les *fonctions utilisateur* : ce sont les fonctions définies par le programmeur, elles agissent sur les données contenues dans l'instance. Très souvent elles restreignent et contrôlent l'accès à ces données permettant l'*encapsulation*. Autrement dit, la nature réelle des données (leur *implémentation*) est cachée à l'utilisateur, seul les moyens de les utiliser (l'*interface*) lui sont accessibles.

4.4.2 La bibliothèque de calcul tensoriel

Cette bibliothèque repose sur deux concepts :

- Un objet de classe `Tens` représente un tenseur (au sens mathématique).
- La *surcharge* des opérateurs algébriques implémente les règles du calcul tensoriel (transposition, addition, produit tensoriel contracté, etc) ainsi que la conversion d'un nombre pur en tenseur d'ordre 0.

Les données contenues dans chaque instance de la classe `Tens` sont :

- Sa *variance* représentée par une chaîne de caractères, un '+' signifiant une composante contravariante et un '-' une composante covariante. Le nombre total de caractères définit donc l'*ordre* du tenseur.
- Ses *indices*, là aussi sous la forme d'une chaîne de caractères. Le nom des indices est restreint à un seul caractère par indice mais n'a pas de signification intrinsèque et peut être modifié à tout moment (notion d'*indices muets*).
- Les valeurs des composantes du tenseur sont organisées sous la forme d'un tableau de D^n éléments où D est la dimension de l'espace et n l'ordre du tenseur.

La variance d'un tenseur est immuable et définie à la création de l'instance (par un argument du constructeur de la classe `Tens`), mais ses indices peuvent être modifiés à tout moment à l'aide d'un opérateur spécifique (nous avons choisi de surcharger l'opérateur `[]`, mais c'est une des possibilités). Nous donnons dans le tableau 11 quelques exemples d'utilisation de cette librairie. Nous pouvons apprécier la simplicité de mise en œuvre du calcul tensoriel avec en outre les avantages suivants :

- Le programme informatique ne change pas quelque soit la dimension de l'espace puisque ce sont les opérateurs de la classe `Tens` qui sont modifiés et non leur interface.
- Les contrôles d'erreurs sur la variance, la compatibilité des indices, etc, sont effectués par les opérateurs eux-mêmes, garantissant le respect des règles du calcul tensoriel.
- Cette bibliothèque peut être testée de façon indépendante et modifiée en laissant le programme qui l'utilise inchangé.

Un effort supplémentaire doit cependant être fait pour que cette bibliothèque puisse s'intégrer parfaitement à notre méthode numérique. Pour résoudre le problème posé par la manipulation d'opérateurs discrétisés nous avons introduit un niveau d'abstraction supplémentaire en considérant que les composantes des tenseurs ne sont plus des nombres simples mais des tableaux

Tableau 11. Exemples d'utilisation de la bibliothèque de calcul tensoriel

Type de calcul	Expression tensorielle	Transcription en C++
Création d'instances de tenseurs : utilisation du constructeur de la classe <code>Tens</code> avec comme premier argument la variance et en second un jeu d'indices.	V^j g^{ij} Γ^i_{jk}	<pre>Tens Vi ("+", "i"); Tens gij ("++", "ij"); Tens Cijk ("+-", "ijk");</pre>
Produit tensoriel contracté, modification des indices, conversion d'un nombre réel en tenseur d'ordre 0 et affectation du résultat à un nouveau tenseur	$V^i = \frac{1}{2} g^{ij} V_j$	<pre>double a = 0.5; Tens gij ("++", "ij"); Tens Vj ("-", "x"); Tens Vi = a * gij * Vj["j"];</pre>

de valeurs dotés de leurs propres opérateurs algébriques et regroupés dans une classe particulière que nous avons appelé `Array1D`. Les instances de cette nouvelle classe représentent l'ensemble des coefficients de l'équation discrétisée pour un volume de contrôle donné, la valeur particulière d'un coefficient est accessible comme un élément de ce tableau et est repéré par des constantes symboliques comme dans l'exemple suivant :

$$\begin{array}{cc} \left[\begin{array}{cccccc} ae & aw & an & as & su & sp & ap \end{array} \right] & \left[\begin{array}{cccccc} ae & aw & an & as & af & ab & su & sp & ap \end{array} \right] \\ 2D & 3D \end{array}$$

Figure 5. Exemple d'affectation des éléments dans un objet `Array1D`

Le cas particulier d'un nombre pur correspond à un objet `Array1D` dont tous les éléments prennent cette valeur. La classe `Array1D` implémentant l'opérateur de conversion nécessaire, cette conversion est totalement transparente pour l'utilisateur, nous noterons par la suite $[x]$ un tel objet. Examinons l'utilisation des divers éléments présentés pour calculer le flux d'un scalaire à travers la facette d'un volume de contrôle, comme dans le cas de l'intégrant de diffusion. Supposons connues les quantités suivantes :

<code>Tens grad("-", "j")</code>	Coefficients discrétisés du gradient d'une variable
<code>Tens gij("++", "ij")</code>	Le tenseur métrique $g^{(ij)}$ au centre de la facette
<code>Tens ni("-", "i")</code>	La normale orientée $n_{(i)}$ relative à cette facette
<code>double h, ds</code>	Le coefficient de diffusion de l'équation de transport et la surface de la facette
<code>Array1D Ai</code>	La variable contenant l'équation discrétisée pour le volume de contrôle considéré

Le flux à calculer a pour expression : $-hg^{(ij)} \frac{\partial \psi}{\partial x^{(j)}} n_{(i)} \Delta s$

Sa traduction en C++ est alors : `Ai = -h * (gij * grad * ni) * ds;`

Dans cette expression les termes entre parenthèses représentent un tenseur contracté deux fois (par l'opérateur * de la classe Tens), donc un "nombre", c'est à dire un objet Array1D qui est ensuite multiplié par h et ds, eux-mêmes convertis au préalable en objets Array1D.

Numériquement parlant, si on considère la facette "est" et la discrétisation proposée au paragraphe 4.2.2, nous avons en une seule ligne de programme effectué les opérations suivantes :

Données initiales :

$$\text{grad} \begin{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{\Delta x^{(1)}} & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{\Delta x^{(1)}} \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} 0 & 0 & \frac{1}{4\Delta x^{(2)}} & -\frac{1}{4\Delta x^{(2)}} & \frac{\psi_{NE} - \psi_{SE}}{4\Delta x^{(2)}} & 0 & 0 \end{bmatrix} \end{bmatrix} \quad \text{gij} \begin{bmatrix} \begin{bmatrix} g^{(11)} \\ g^{(12)} \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} g^{(21)} \\ g^{(22)} \end{bmatrix} \end{bmatrix} \quad \text{ni} \begin{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \end{bmatrix}$$

$$\text{Terme } \text{gij} * \text{grad} * \text{ni} : \begin{bmatrix} \frac{g^{(11)}}{\Delta x^{(1)}} & 0 & \frac{g^{(12)}}{4\Delta x^{(2)}} & -\frac{g^{(12)}}{4\Delta x^{(2)}} & \frac{g^{(12)} (\psi_{NE} - \psi_{SE})}{4\Delta x^{(2)}} & 0 & -\frac{g^{(11)}}{\Delta x^{(1)}} \end{bmatrix}$$

$$\text{Finalement : } Ai = \begin{bmatrix} -\frac{hg^{(11)} ds}{\Delta x^{(1)}} & 0 & -\frac{hg^{(12)} ds}{4\Delta x^{(2)}} & \frac{hg^{(12)} ds}{4\Delta x^{(2)}} & \frac{hg^{(12)} (\psi_{NE} - \psi_{SE}) ds}{4\Delta x^{(2)}} & 0 & \frac{hg^{(11)} ds}{\Delta x^{(1)}} \end{bmatrix}$$

Cet exemple montre que le niveau d'abstraction obtenu en considérant les tenseurs comme des objets dont les composantes sont des tableaux de valeurs représentant l'équation discrétisée permet d'approcher de très près la formulation mathématique originale, la difficulté du calcul étant reportée dans les classes d'objets et dans quelques fonctions spécifiques (tel que le calcul d'un gradient, des dérivées covariantes, etc.). Un autre avantage de cette méthode résulte de la localisation dans quelques opérateurs de la discrétisation proprement dite, permettant ainsi une grande souplesse dans le choix et la modification des coefficients.

L'inconvénient majeur réside dans les calculs superflus qui sont systématiquement effectués, par exemple si le tenseur métrique est diagonal, dégradant un peu les performances de l'ensemble. Ceci est partiellement compensé par la généralité du programme qui permet de traiter indifféremment des maillages fixes ou évolutifs en 2 ou 3 dimensions.

5 Méthodes de résolution des équations de transport

Dans le cas d'écoulements incompressibles, la pression ne peut être déterminée par une loi d'état. Elle n'a donc pas d'équation propre et il est naturel de l'extraire de l'équation de continuité qui n'a pas ses propres variables dépendantes. Ceci a été réalisé de différentes façon par HARLOW et AMSDEN en 1971, PATANKAR et SPALDING en 1972.

La méthode la plus utilisée est SIMPLE, proposée par Patankar en 1980. Une autre méthode, qui semble particulièrement efficace, est apparue en 1985 à l'issue des travaux de Vanka et Brandt sur les méthodes multigrilles. Dans ce travail nous avons adopté la méthode SCGS (Symmetric Coupled Gauss-Siedel) de Vanka décrite dans [Vanka 86], adaptée aux maillages non orthogonaux. Afin de justifier notre choix nous la comparerons à SIMPLE en terme de performance et de robustesse.

5.1 Procédure de résolution SIMPLE

Nous rappelons brièvement les grandes lignes de cette méthode.

5.1.1 Equations de correction de la vitesse et de la pression

Supposons le champ de pression et la vitesse connus. Ces variables sont les solutions d'un système linéaire d'équations dont la forme discrétisée canonique est la suivante :

$$a_P \psi_P^* + \sum_m a_m \psi_m^* = S_{\psi^*}$$

dans laquelle les quantités étoilées sont des approximations de la solution.

Le terme source pour les équations de quantité de mouvement contient la contribution du gradient de pression :

$$S_{v^{(i)}} = b - g^{(ij)} \frac{\partial p}{\partial x^{(j)}} \vartheta$$

On se propose de déterminer une procédure permettant au champ de vitesse de vérifier l'équation de continuité.

Correction de la vitesse

Supposons que le champ de pression soit dans ce cas donné par :

$$p = p^* + p'$$

p' étant la correction de pression nécessaire pour obtenir le champ de pression vrai à partir de son approximation p^* . De manière similaire, cherchons le nouveau champ de vitesse sous la forme :

$$V^{(i)} = V^{*(i)} + V'^{(i)}$$

Si nous introduisons ces deux relations dans l'équation discrétisée de la vitesse, nous constatons que nous pouvons écrire au premier ordre une relation entre les corrections de vitesse et de pression :

$$V'^{(i)} = \frac{\partial V^{(i)}}{\partial \left(\frac{\partial p}{\partial x^{(i)}} \right)} \cdot g^{(ij)} \frac{\partial}{\partial x^{(j)}} p'$$

Le premier terme du membre de droite s'exprime à l'aide des coefficients de l'équation discrétisée¹ :

$$\left. \frac{\partial V^{(i)}}{\partial \left(\frac{\partial p}{\partial x^{(i)}} \right)} \right|_P \approx \left. \frac{\vartheta}{\delta x^{(i)} a_P^{V^{(i)}}} \right|_P$$

Le gradient de correction de pression est discrétisé comme celui de la pression, nous rappelons que dans le cas de coordonnées non orthogonales il faut tenir compte des gradients croisés. On obtient alors une évaluation de la vitesse corrigée :

$$V_P^{(1)} = V_P^{*(1)} - \left. \frac{g^{(11)} \vartheta}{\delta x^{(1)} a_P^{V^{(1)}}} \right|_P \cdot (p'_e - p'_w) - \left. \frac{g^{(12)} \vartheta}{\delta x^{(2)} a_P^{V^{(1)}}} \right|_P \cdot (p'_n - p'_s)$$

ou plus simplement :

$$V_P^{(1)} = V_P^{*(1)} - d_P (p'_e - p'_w) - e_P (p'_n - p'_s)$$

avec les notations de la grille de $V^{(1)}$ et des expressions similaires pour les autres composantes.

Correction de la pression

L'équation de continuité intégrée sur un volume de contrôle de la pression permet alors d'écrire une équation pour la correction de pression :

¹ Nous négligeons l'influence des voisins immédiats, pour la justification de cette omission voir [Patankar 80]

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\Delta}{\Delta x^{(i)}} (\rho V^{(i)}) = 0 \Rightarrow a_P p'_P + \sum_m a_m p'_m = b$$

dans laquelle :

$$a_m = -\rho_m d_m ds_m \quad a_P = -\sum_m a_m$$

$$b = \frac{(\rho^0 - \rho) \vartheta}{\Delta t} \Big|_P + (\rho dV^{*(1)} \Big|_w - \rho dV^{*(1)} \Big|_e) \delta x^{(2)} + (\rho dV^{*(2)} \Big|_s - \rho dV^{*(2)} \Big|_n) \delta x^{(1)}$$

les notations étant maintenant celles de la grille des scalaires.

Dans cette discrétisation nous avons omis les gradients croisés e de la correction de pression : ces termes peuvent être négatifs et affecter la stabilité de la procédure de résolution.

Les conséquences de cette omission concernent principalement la vitesse de convergence de la procédure globale de résolution et, dans une moindre mesure, la précision des résultats. En effet, les gradients de pression normaux sont en général plus importants que les gradients croisés comme le montre le rapport suivant :

$$\frac{d}{e} \Big|_e = \frac{g^{(11)}}{g^{(12)}} \Big|_e \cdot \frac{\delta x^{(1)}}{\delta x^{(2)}} \Big|_e \approx -\cos \alpha_e \cdot \frac{\delta x^{(1)}}{\delta x^{(2)}} \Big|_e, \quad \alpha_e \text{ étant l'angle local des vecteurs de base}$$

L'approximation est donc restreinte aux petits défauts d'orthogonalité et de rapport d'aspect des volumes de contrôle.

5.1.2 Algorithme de résolution SIMPLE

Les étapes de la résolution itérative des équations sont, pour un pas de temps, les suivantes :

1. Initialiser les variables principales V , p , T , k , ε aux valeurs du pas de temps précédent (ou à des valeurs arbitraires pour le premier).
2. Résoudre les équations de quantité de mouvement pour obtenir une approximation V^* de la vitesse.
3. Construire et résoudre l'équation pour la correction de pression p' .
4. Ajouter p' à p^* (éventuellement sous-relaxer) et corriger les vitesses.
5. Résoudre les autres équations si elles influencent l'écoulement.
6. Calculer les résidus et le défaut de masse (terme b de l'équation de correction de pression) pour l'ensemble des équations.
7. Si la convergence n'est pas atteinte, recommencer à l'étape 2 en prenant pour p^* la pression corrigée.
8. Résoudre les équations qui n'influencent pas l'écoulement.

5.1.3 Conditions aux limites pour la correction de pression

La seule possibilité simple pour prendre en compte des conditions aux limites est de considérer les vitesses connues. Dans ce cas on fixera la correction de pression nulle au nœud de vitesse concernant en posant $a_i = 0$ dans l'équation de correction de pression.

Notons que plusieurs auteurs ont proposé d'autres méthodes (tels qu'un bilan de masse sur le volume de contrôle de la vitesse), mais que les résultats ne sont pas concluants.

5.2 Procédure de résolution SCGS

La méthode SIMPLE et ses variantes (SIMPLER, SIMPLEST), bien qu'efficace dans la majorité des cas, souffre d'un certain nombre de limitations que nous allons énumérer :

- L'équation de conservation n'est vérifiée qu'à convergence.
- Nécessité de sous-relaxer fortement les corrections de pression et les équations de qdm quand le nombre de Reynolds devient important (typiquement $\alpha = 0.3$ pour la vitesse et 0.5 pour la pression quand $Re \geq 10^3$).
- Taux de réduction des résidus (R^{n+1} / R^n) faible impliquant un grand nombre d'itérations.
- Performances liées à la taille des mailles et à la qualité de la discrétisation : la correction de pression n'est liée aux équations de qdm que par le coefficient A_p et des termes géométriques.

En 1985, Vanka proposa dans [Vanka 86] une alternative permettant de s'affranchir de ces problèmes grâce à une méthode appelée SCGS que nous allons présenter en la généralisant aux maillages non-orthogonaux. Pour ne pas alourdir les notations, les explications données ici concernent un espace de dimension deux, mais sa généralisation ne pose aucun problème.

L'idée est de considérer un volume de contrôle de la pression et les nœuds de vitesse adjacents comme sur la figure 6.

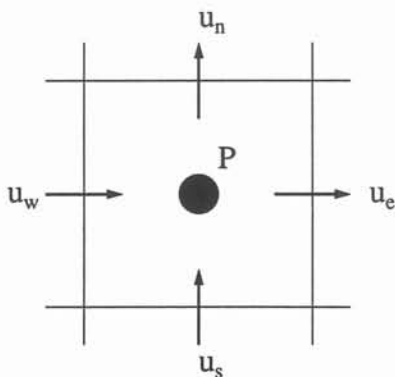


Figure 6. Notations de voisinage pour un nœud de pression dans SCGS

Les équations à résoudre sont celles de la quantité de mouvement, discrétisées de la même façon que précédemment mais dont les termes sources ne contiennent pas le gradient de pression, ainsi que l'équation de continuité. Pour un nœud de pression, nous avons donc le système suivant :

$$\begin{aligned}
 (A_P)_w u_w &= - \sum_m A_m u_m + b_w - \left(g^{(11)} \frac{\vartheta}{\delta x^{(1)}} \right)_w (p_P - p_w) \\
 (A_P)_e u_e &= - \sum_m A_m u_m + b_e - \left(g^{(11)} \frac{\vartheta}{\delta x^{(1)}} \right)_e (p_E - p_P) \\
 (A_P)_n u_n &= - \sum_m A_m u_m + b_n - \left(g^{(22)} \frac{\vartheta}{\delta x^{(2)}} \right)_n (p_N - p_P) \\
 (A_P)_s u_s &= - \sum_m A_m u_m + b_s - \left(g^{(22)} \frac{\vartheta}{\delta x^{(2)}} \right)_s (p_P - p_s) \\
 \sum_m \varepsilon_m \rho_m u_m ds_m &= \frac{\rho_P^0 - \rho_P}{\Delta t} \vartheta_P \quad \varepsilon = \begin{cases} 1 & m = (e, n) \\ -1 & m = (w, s) \end{cases}
 \end{aligned}$$

L'indice m représente, pour chaque équation les nœuds de vitesse voisins du nœud central e, w, n et s. Comme dans le cas de SIMPLE, cherchons des corrections de vitesse et de pression qui permettent de satisfaire ce système sous la forme :

$$u = u^* + u' \quad p_P = p_P^* + p'_P$$

Séparons les quantités connues des corrections :

$$\begin{aligned}
 (A_P)_w u'_w + \left(g^{(11)} \frac{\vartheta}{\delta x^{(1)}} \right)_w p'_P &= - \sum_m A_m u_m^* + b_w - (A_P)_w u_w^* - \left(g^{(11)} \frac{\vartheta}{\delta x^{(1)}} \right)_w (p_P^* - p_w^*) \\
 \dots & \\
 \sum_m \varepsilon_m \rho_m u'_m ds_m &= - \sum_m \varepsilon_m \rho_m u_m^* ds_m + \frac{\rho_P^0 - \rho_P}{\Delta t} \vartheta_P
 \end{aligned} \tag{20}$$

Le système à résoudre en terme de corrections s'écrit alors, en notant R_m et R_P les résidus correspondants aux membres de droite :

$$\begin{aligned}
 (A_P)_e u'_e - \left(g^{(11)} \frac{\vartheta}{\delta x^{(1)}} \right)_e p'_P &= R_e & (A_P)_w u'_w + \left(g^{(11)} \frac{\vartheta}{\delta x^{(1)}} \right)_w p'_P &= R_w \\
 (A_P)_n u'_n - \left(g^{(22)} \frac{\vartheta}{\delta x^{(2)}} \right)_n p'_P &= R_n & (A_P)_s u'_s + \left(g^{(22)} \frac{\vartheta}{\delta x^{(2)}} \right)_s p'_P &= R_s \\
 \sum_m \varepsilon_m \rho_m u'_m ds_m &= R_P
 \end{aligned}$$

Ce système peut se mettre sous la forme matricielle suivante :

$$\begin{bmatrix}
A_{P_e} & 0 & 0 & 0 & -\left(g^{(11)} \frac{\vartheta}{\delta x^{(1)}}\right)_e \\
0 & A_{P_w} & 0 & 0 & \left(g^{(11)} \frac{\vartheta}{\delta x^{(1)}}\right)_w \\
0 & 0 & A_{P_n} & 0 & -\left(g^{(22)} \frac{\vartheta}{\delta x^{(2)}}\right)_n \\
0 & 0 & 0 & A_{P_s} & \left(g^{(22)} \frac{\vartheta}{\delta x^{(2)}}\right)_s \\
\rho_e ds_e - \rho_w ds_w & \rho_n ds_n - \rho_s ds_s & 0 & 0 & 0
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix}
u'_e \\
u'_w \\
u'_n \\
u'_s \\
p'_P
\end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix}
R_e \\
R_w \\
R_n \\
R_s \\
R_P
\end{bmatrix}$$

Il peut être résolu analytiquement en remarquant qu'il est de la forme $\begin{bmatrix} A & B \\ {}^T C & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u' \\ p' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} R \\ R_P \end{bmatrix}$

L'identification avec le système précédent montre que A est diagonale, son inversion est

immédiate : $A^{-1} = \begin{bmatrix} A_{P_e}^{-1} & & & & \\ & A_{P_w}^{-1} & & & \\ & & A_{P_n}^{-1} & & \\ & & & A_{P_s}^{-1} & \\ & & & & A_{P_P}^{-1} \end{bmatrix}$

La solution est alors (sous forme matricielle) : $p' = \frac{{}^T C A^{-1} R - R_P}{{}^T C A^{-1} B}$ $u' = A^{-1} (R - B p')$

Nous donnons ici le calcul complet des corrections :

$$\begin{aligned}
{}^T C A^{-1} B &= -\left(\rho g^{(11)} \frac{\vartheta}{\delta x^{(1)}} \frac{ds}{A_P}\right)_e - \left(\rho g^{(11)} \frac{\vartheta}{\delta x^{(1)}} \frac{ds}{A_P}\right)_w - \left(\rho g^{(22)} \frac{\vartheta}{\delta x^{(2)}} \frac{ds}{A_P}\right)_n - \left(\rho g^{(22)} \frac{\vartheta}{\delta x^{(2)}} \frac{ds}{A_P}\right)_s \\
{}^T C A^{-1} R - R_P &= \left(\rho \frac{ds}{A_P}\right)_e R_e - \left(\rho \frac{ds}{A_P}\right)_w R_w + \left(\rho \frac{ds}{A_P}\right)_n R_n - \left(\rho \frac{ds}{A_P}\right)_s R_s - R_P
\end{aligned} \tag{21}$$

Ces relations permettent le calcul de p', les corrections de vitesse sont alors :

$$\begin{aligned}
u'_e &= \left(R_e + \left(g^{(11)} \frac{\vartheta}{\delta x^{(1)}}\right)_e p'\right) / A_{P_e} & u'_w &= \left(R_w - \left(g^{(11)} \frac{\vartheta}{\delta x^{(1)}}\right)_w p'\right) / A_{P_w} \\
u'_n &= \left(R_n + \left(g^{(22)} \frac{\vartheta}{\delta x^{(2)}}\right)_n p'\right) / A_{P_n} & u'_s &= \left(R_s - \left(g^{(22)} \frac{\vartheta}{\delta x^{(2)}}\right)_s p'\right) / A_{P_s}
\end{aligned} \tag{22}$$

Notons que la sous-relaxation des équations de qdm se fait simplement en posant :

$$A_{P_m} = \frac{A_{P_m}}{\alpha_m} \quad 0 < \alpha_m \leq 1$$

On termine le calcul en corrigeant les vitesses et la pression (qui peut éventuellement être

sous-relaxée) :

$$u_m = u_m^* + u'_m \quad p_p = p_p^* + \alpha_p p'_p \quad (23)$$

Ce calcul doit bien entendu être répété pour l'ensemble des nœuds de pression.

5.2.1 Améliorations de SCGS

Les performances de cette méthode peuvent être améliorées en effectuant plusieurs balayages en pression avant de reconstruire les équations de qdm. Nous avons trouvé que $N / 2$ itérations, où N est le nombre moyen de nœuds de pression selon une direction, suffisait largement pour atteindre la vitesse de convergence maximale.

Dans le cas de conditions aux limites complexes, on peut encore améliorer les performances en effectuant des balayages alternés. Ceci s'explique par le fait que, dans son essence, SCGS n'est autre qu'une méthode de Gauss-Siedel point par point connue pour propager les conditions aux limites nœud par nœud à chaque itération.

5.2.2 Algorithme pour SCGS

La procédure SCGS se décompose donc ainsi pour chaque pas de temps :

1. Discrétisation des équations de quantité de mouvement
2. Calculer les coefficients des matrices B et C (optimisation des performances)
3. Pour chaque sous-itération de SCGS :
 - 3.1. Pour chaque nœud de pression :
 - 3.1.1 Calculer les résidus R_m et R_p par (20)
 - 3.1.2 Sous-relaxer les coefficients $(A_p)_m$
 - 3.1.3 Calculer la correction de pression par (21)
 - 3.1.4 Calculer les corrections de vitesse par (22)
 - 3.1.5 Corriger la pression et les vitesses par (23)
 - 3.2. Calculer les résidus globaux pour la vitesse et la pression (défaut de masse)
 - 3.3. Si la convergence ou le nombre maximum de sous-itérations n'est pas atteint, retour en 3.1
4. Construire et résoudre les autres équations
5. Si la convergence n'est pas atteinte, retour en 1

5.2.3 Avantages de SCGS sur SIMPLE

- L'équation de continuité est satisfaite à chaque itération pour chaque nœud de pression.
- A l'exception des nœuds en limite de domaine, chaque nœud de vitesse est mis

à jour deux fois au cours du balayage des nœuds de pression

- L'ensemble des coefficients des équations de qdm intervient par le biais des résidus R_m
- Surcoût en calcul faible : la résolution du système local est plus rapide que la construction et la résolution d'une équation de correction de pression, surtout pour de grands maillages
- Economie de mémoire : pas de correction de pression ou de vitesse à stocker, les résidus globaux peuvent être calculés de façon incrémentale

La pratique montre que, même pour de grands nombres de Reynolds, il n'est pas nécessaire de sous-relaxer la pression et que les coefficients de sous-relaxation pour la vitesse sont en général élevés ($\alpha_u \geq 0.7$). Le lecteur intéressé par les performances relatives de SIMPLE et SCGS pourra se reporter à l'annexe C.

5.2.4 Conditions aux limites en pression

On peut facilement introduire des conditions aux limites sur la pression en modifiant les résidus. Considérons un volume de contrôle dont la facette w est soumise à la condition $p_w = p_b$. L'équation de qdm du système local est modifiée comme suit :

$$(A_P)_w u'_w + \left(g^{(11)} \frac{\vartheta}{\delta x^{(1)}/2} \right)_w p'_P = - \sum_m A_m u_m^* + b_w - (A_P)_w u_w^* - \left(g^{(11)} \frac{\vartheta}{\delta x^{(1)}/2} \right)_w (p_P^* - p_b)$$

Si c'est le gradient Δp qui est imposé, on se ramène à la forme précédente en posant :

$$p_b = p_P^* - \frac{\delta x^{(1)} \Delta p}{2 g^{(11)}}$$

Lorsque la vitesse u_w est connue, il faut appliquer une condition de type Neumann en posant :

$$\Delta p = 0 \Leftrightarrow p_b = p_P^*$$

5.3 Conclusion sur les méthodes numériques

Quelques tests et essais préliminaires nous ont rapidement convaincu de la supériorité de SCGS sur SIMPLE. Tous les calculs que nous présenterons par la suite ont été obtenus en utilisant cette méthode, nous avons ainsi pu réduire dans un rapport de 100 à 1000 le nombre d'itérations nécessaires, ce qui correspond à un gain en temps de calcul proportionnel.

6 Ecoulement thermocapillaire sous la tâche chaude

Chan [Chan 88a] et Sanochkin [Sanochkin 89] ont établi un modèle analytique donnant une solution explicite des équations de Navier-Stokes et de l'énergie dans le cas d'un fluide incompressible en géométrie semi-infinie. Dans ces deux travaux l'effet thermocapillaire résulte d'un chauffage non uniforme de la surface libre et le comportement du fluide est examiné dans le cas où la densité de puissance incidente décroît paraboliquement. Les auteurs se sont intéressés à la forme que prennent les solutions pour les faibles et grands nombres de Prandtl, bien que Sanochkin propose une formulation générale. Nous présenterons brièvement leurs démarches et les hypothèses liées à ces modèles. Cet exposé sera suivi des principaux résultats et plus particulièrement de ceux qui seront utilisés en relation avec le modèle numérique. Nous aurons ainsi la possibilité de valider notre modèle numérique une première fois en comparant nos résultats avec ceux obtenus par Sanochkin dans [Sanochkin 87] et une seconde fois en le confrontant avec les prédictions des modèles analytiques. Cette démarche nous permettra de mettre en évidence un changement de régime d'écoulement et la nécessité d'une approche globale du problème.

6.1 Le modèle de Chan et Sanochkin

Le fluide occupe une région bidimensionnelle semi-infinie définie par $y > 0$, la surface libre $y = 0$ est soumise à un flux de chaleur $q(x) = q_0 - q_1 x^2$ (q_0 et $q_1 > 0$). Le problème étant symétrique par rapport au plan $x = 0$, seul le cas $x \geq 0$ sera étudié¹. Les conditions aux limites sont les suivantes :

$$y = 0 : \mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) = \sigma_r \frac{\partial T}{\partial x} \quad \frac{\partial T}{\partial y} = -\frac{q}{k} \quad v = 0 \quad p = cte$$

$$y = \infty : u = 0 \quad T = T_\infty \quad x = 0 : u = 0 \quad \frac{\partial T}{\partial x} = 0$$

Les auteurs proposent, en combinant les équations de quantité de mouvement et de l'énergie avec les conditions aux limites précédentes de chercher les solutions affines sous la forme :

$$u = f'x \quad v = -f \quad p = \rho F \quad T - T_\infty = g - hx^2$$

dans lesquelles f , F , g et h sont des fonctions de y seulement.

¹ Nous présentons ici les résultats dans le cas d'une configuration plane, mais les auteurs ont aussi étudié le cas d'une géométrie axisymétrique.

Ces équations sont ensuite adimensionnalisées pour aboutir au système suivant (après simplification) :

$$\begin{aligned} \tilde{f}''' + \tilde{f}\tilde{f}'' - \tilde{f}^2 &= 0 & \tilde{f}(0) = \tilde{f}(\infty) &= 0 & \tilde{f}''(0) + \tilde{h}(0) &= 0 \\ \frac{1}{Pr}\tilde{g}'' + \tilde{f}\tilde{g}' &= 0 & \tilde{g}'(0) &= -1 & \tilde{g}(\infty) &= 0 \\ \frac{1}{Pr}\tilde{h}'' + \tilde{f}\tilde{h}' - 2\tilde{f}\tilde{h} &= 0 & \tilde{h}'(0) &= -1 & \tilde{h}(\infty) &= 0 \end{aligned}$$

A partir de ce système, les méthodes de résolution des deux auteurs diffèrent, mais ils aboutissent aux mêmes résultats lorsqu'ils examinent les solutions à faible et grand nombre de Prandtl. Chan résout ces équations par une méthode numérique (Runge-Kutta à l'ordre 4) alors que Sanochkin propose une méthode simple et directe basée sur une décomposition en séries d'exponentielles (cette méthode est détaillée à l'annexe B et est accompagnée d'un programme permettant de calculer tous les paramètres du modèle). Leur analyse conduit aux solutions suivantes pour la température maximale sous le faisceau T_{\max} ($x = 0$) et le profil de vitesse en surface u_x ($y = 0, x \geq 0$) :

$$u_x = B \nu x \left(\frac{2\sigma_T q_1}{k\mu\nu} \right)^{1/2} Pr^{m_u} \quad (24)$$

$$T_{\max} = A \frac{q_0}{k} \left(\frac{k\mu\nu}{2\sigma_T q_1} \right)^{1/4} Pr^{m_T} \quad (25)$$

où les constantes A, B, m_T et m_u sont données dans le tableau 12.

Tableau 12. Constantes du modèle de Chan et Sanochkin

		A^*	m_T	B^*	m_u
2D	$Pr \ll 1$	$3^{1/4}$	-3/4	$3^{-1/2}$	-1/2
	$Pr \gg 1$	1.410	-3/8	0.791	-1/4
axi	$Pr \ll 1$	0.915	-3/4	0.608	-1/2
	$Pr \gg 1$	1.103	-3/8	0.790	-1/4

* Valeurs calculées par la méthode de Sanochkin

6.1.1 Domaine de validité des équations (24) et (25)

Ces équations représentant des comportements asymptotiques, il est nécessaire de déterminer sur quels intervalles du nombre de Prandtl elles peuvent être appliquées. Pour cela nous utilisons le programme de l'annexe B qui permet de calculer pour tout nombre de Prandtl les coef-

ficients APr^{m_u} et BPr^{m_r} . Sur les figures 7 et 8 nous pouvons comparer ces valeurs avec celles données par les lois limites.

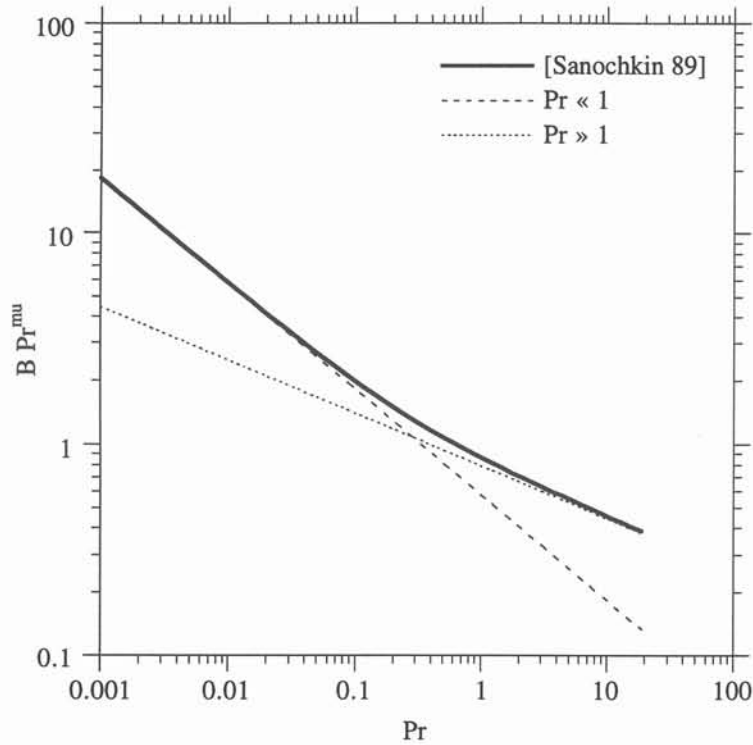


Figure 7. Coefficient de la loi de vitesse en fonction du nombre de Prandtl obtenus avec le programme donné en annexe.

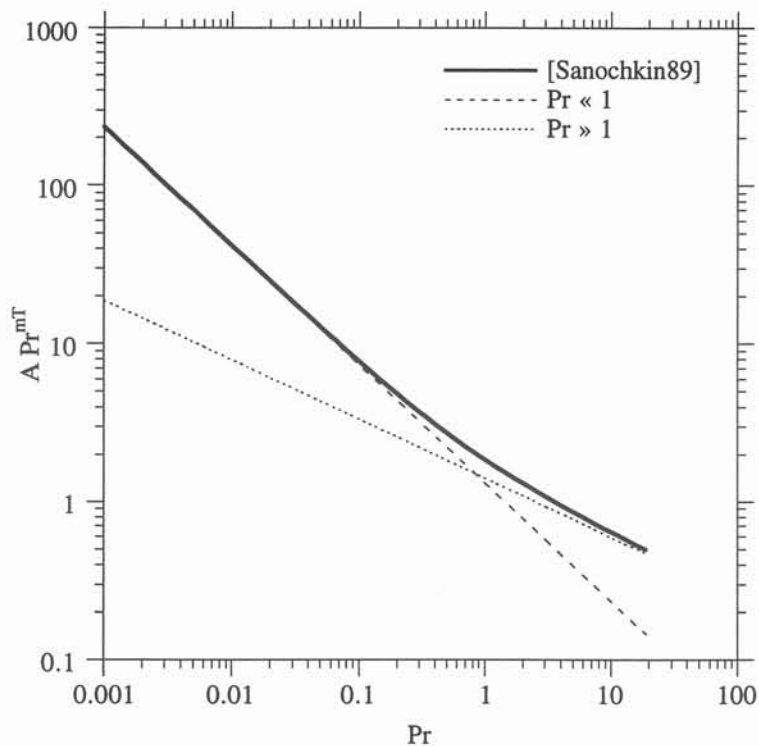


Figure 8. Coefficient de la loi de température en fonction du nombre de Prandtl obtenus avec le programme donné en annexe.

En utilisant ces résultats, nous pouvons déterminer le domaine de validité des lois asymptotiques. Ces intervalles, résumés dans le tableau 13, montrent que dans le cas du titane

($Pr = 0.08$) nous pouvons utiliser les lois limites.

Tableau 13. Domaine de validité des lois asymptotiques

	$Pr \ll 1$	$Pr \gg 1$
U_r	$0 < Pr \leq 0.2$	$1 < Pr \leq 20$
T_m	$0 < Pr \leq 0.5$	$2 < Pr \leq 20$

6.1.2 Structure de la couche limite

Les modèles permettent d'avoir un ordre de grandeur des couches limites thermiques et visqueuses, et plus précisément de leur rapport :

$$Pr \ll 1 : \delta_k / \delta_v = Pr^{-1} \quad Pr \gg 1 : \delta_k / \delta_v = Pr^{-1/3}$$

Nous constatons que pour les métaux liquides (pour lesquels $Pr < 1$) la couche limite thermique est plus importante que la couche limite visqueuse. De plus, si nous comparons ce rapport avec le résultat classique obtenu en convection forcée pour lequel $\delta_k / \delta_v = Pr^{-1/2}$, nous voyons que l'écoulement engendré par les forces thermocapillaires aura une structure différente de celle d'un écoulement en convection forcée. Cet aspect sera à prendre en compte lors de la modélisation numérique, notamment lorsque nous considérerons les échanges thermiques en surface.

6.1.3 Température en surface

La relation (25) donnant la température au centre fait intervenir, outre les propriétés physiques du matériau, les caractéristiques du faisceau. Par conséquent, si nous comparons T_m pour un fluide soumis à deux faisceaux différents A et B, nous obtenons :

$$\frac{T_{max}^A}{T_{max}^B} = \frac{q_0^A}{q_0^B} \left(\frac{q_1^B}{q_1^A} \right)^{1/4} \quad (26)$$

Nous utiliserons cette relation pour vérifier et définir les limites de validité respectives des modèles analytiques et numériques.

6.1.4 Profil de vitesse en surface

La relation (24) permet de constater que sur une portion (à définir) de la surface libre le profil de vitesse est linéaire et de la forme $u_x = x f(q_1)$ pour un matériau donné. Cette relation est importante et caractérise en partie l'écoulement capillaire puisque nous voyons que le gradient

horizontal de vitesse est constant pour un matériau donné et ne dépend que de la courbure (q_1) du flux thermique. De plus, pour deux faisceaux A et B nous avons :

$$\frac{u_x^A}{u_x^B} = \sqrt{\frac{q_1^A r^A}{q_1^B r^B}} \quad (27)$$

6.1.5 Correspondance entre loi parabolique et distribution gaussienne

Rappelons que l'hypothèse de base de ces modèles est un dépôt d'énergie à décroissance parabolique. En pratique le flux thermique d'un faisceau électronique ou laser a une répartition proche d'une distribution de Gauss (nous utiliserons d'ailleurs une telle loi dans nos simulations). Néanmoins, un développement en série de Taylor de cette loi montre qu'elle peut être assimilée à une parabole sur une zone de rayon R et que l'on peut relier celui-ci aux paramètres

$$\text{du modèle grâce à la correspondance suivante : } q = q_a e^{-\frac{r^2}{R^2}} \Rightarrow q_0 = q_a \quad q_1 = \frac{q_a}{R^2}$$

Nous avons ainsi une mesure de la "tâche chaude" où les effets thermocapillaires sont les plus significatifs. Remarquons aussi que R est le rayon qui annule $q(r)$ dans la loi parabolique, et définit donc le domaine de validité du modèle par la condition $q(r) \geq 0$. De ce fait nous avons $r = \sqrt{q_0/q_1}$ dans la relation (24) et nous obtenons une vitesse caractéristique u_c de l'effet

$$\text{thermocapillaire : } u_c = Bv \left(\frac{2\sigma_T q_0}{k\mu v} \right)^{1/2} Pr^{\alpha_u}$$

Dans le cadre d'une modélisation numérique, nous devons vérifier l'hypothèse d'un milieu semi-infini : les simulations se faisant dans un domaine borné, il faut interpréter cette notion d'infini. Nous pouvons le faire à la lumière de ce qui vient d'être dit puisque, pour $r > R$, les effets thermocapillaires perdent de leur importance. Nous pouvons ainsi considérer que les effets de bords numériques sont négligeables lorsque la longueur caractéristique L du domaine d'étude est grande devant R .

6.2 Comparaison entre les modèles numériques et analytiques

Nous avons dans un premier temps comparé nos résultats numériques avec ceux disponibles dans [Sanochkin 87] afin de juger de la qualité de notre modèle dans le cas de l'effet thermocapillaire. Dans un second temps, une confrontation avec le modèle analytique permettra la vérification des lois d'évolution de la température et de la vitesse en surface en fonction des caractéristiques du faisceau et la mise en évidence d'un changement dans la nature de l'écoulement pour un nombre de Marangoni critique.

6.3 Comparaison avec les résultats de [Sanochkin 87]

On considère une cavité rectangulaire de longueur L et de hauteur h contenant un liquide chauffé à sa partie supérieure par un flux de chaleur de densité $q(x) = q_a \exp(-x^2/a^2)$ où a représente le "rayon efficace" du faisceau ainsi modélisé. En choisissant $L \gg h > a$, nous nous plaçons dans de bonnes conditions pour simuler un chauffage local de la surface.

Le flux de chaleur étant symétrique par rapport à $x = 0$, l'écoulement l'est aussi, nous n'étudions donc que le demi-plan $x \geq 0$. L'ensemble de ces conditions est présenté figure 9.

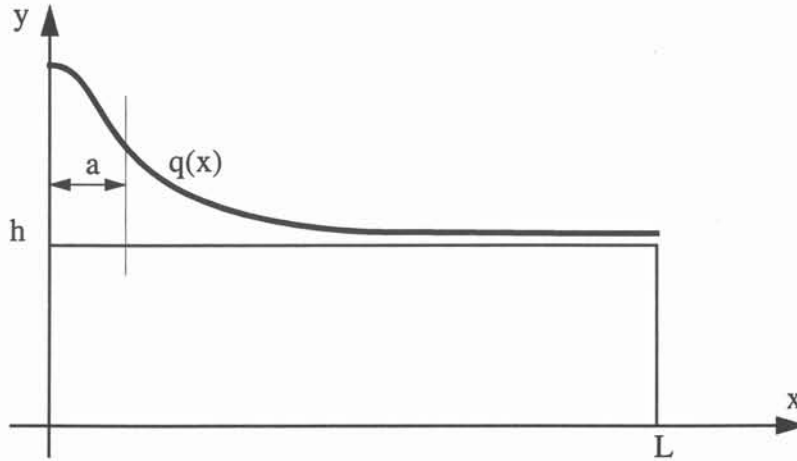


Figure 9. Schéma de la cavité et caractéristiques géométriques

6.3.1 Formulation du problème

Sanochkin propose de prendre comme unités h pour la longueur, v/h pour la vitesse et $\rho v^2/\sigma_T h$ pour la température où v est la viscosité cinématique, ρ la densité et σ_T le coefficient de tension superficielle. Ces propriétés sont constantes et indépendantes de la température. Dans ce nouveau système d'unités, l'auteur exprime les équations de quantité de mouvement et de l'énergie en utilisant la formulation en fonction de courant ψ et vorticité ω . Le système à résoudre est alors le suivant :

$$\omega = -\Delta\psi \quad \frac{\partial}{\partial x}(\omega\psi) + \frac{\partial}{\partial y}(\omega\psi) = \Delta\omega \quad Pr \left[\frac{\partial}{\partial x}(\psi T) + \frac{\partial}{\partial y}(\psi T) \right] = \Delta T$$

auquel il convient d'ajouter les conditions aux limites suivantes :

$$\begin{array}{ll} x = 0 : & \omega = 0, \psi = 1, \partial T/\partial x = 0 \\ x = A : & T = 0, \psi = 1 \\ y = 0 : & T = 0, \psi = 1 \\ y = 1 : & \psi = 1, \omega = \partial T/\partial x, \partial T/\partial y = Q f(x) \end{array}$$

Ces équations dépendent du nombre de Prandtl Pr , du rapport d'aspect $A = L/h$ de la cavité et du paramètre adimensionnel Q représentant un flux énergétique dont l'expression est :

$$Q = \frac{\sigma_T q_a h^2}{k \mu v} = \frac{Ma}{Pr} \quad (28)$$

où Ma est le nombre de Marangoni exprimé à l'aide du gradient de température $q_a h/k$:

$$Ma = \frac{\sigma_T q_a h^2}{k \alpha \mu} \quad (29)$$

Sanochkin utilise pour résoudre ces équations une méthode aux différences finies.

Pour notre part, la méthode des volumes finis étant utilisée, la formulation en (ω, ψ) n'est pas adéquate¹. Aussi avons-nous préféré utiliser les équations de transport et de l'énergie sous la forme classique adimensionnelle (exprimées en coordonnées cartésiennes) :

$$u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = \Delta u - \frac{\partial p}{\partial x} \quad u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} = \Delta v - \frac{\partial p}{\partial y} \quad Pr \left[u \frac{\partial T}{\partial x} + v \frac{\partial T}{\partial y} \right] = \Delta T$$

avec les conditions aux limites :

$$x = 0 : \quad \partial v / \partial x = 0, u = 0, \partial T / \partial x = 0$$

$$x = A : \quad u = v = 0, T = 0$$

$$y = 0 : \quad u = v = 0, T = 0$$

$$y = 1 : \quad \tau \cdot \mathbf{n} = -\partial T / \partial x, v = 0, \partial T / \partial y = Q f(x)$$

Afin de pouvoir comparer nos résultats avec ceux de [Sanochkin 87] nous avons pris les valeurs suivantes pour les différents paramètres du modèle :

$h = 1, a = 0.5, A = 10, Pr = 1$, maillage 20×20 devenant plus dense vers les parois.

Nous montrons aux figures 10 à 12 les isothermes et le champ de vitesse obtenus pour $Q = 1$. La figure 13 présente les profils de vitesse et de température le long de la surface.

6.3.2 Caractéristiques de l'écoulement thermocapillaire

Ces figures mettent en évidence les caractéristiques génériques d'un écoulement thermocapillaire lorsque la surface libre est modérément chauffée ($Ma \approx 1$) par un faisceau focalisé :

- L'écoulement est symétrique par rapport au faisceau et s'organise dans chaque demi-plan en une cellule de convection, le fluide étant entraîné des régions chaudes vers les régions froides puisque $\sigma_T < 0$. Cette cellule est de faible dimension ($\approx 4a$) et n'interfère pas avec la paroi froide (nous vérifions la condition $L \gg a$).
- Le maximum de la vitesse intervient en $x \approx a$, au-delà les forces thermocapillaires ne sont plus motrices et le fluide n'est plus sensible qu'aux forces d'inertie.

¹ Le programme permet tout de même le calcul de ω et ψ par $\omega = \text{rot}_z(\vec{V})$ puis résolution de $-\Delta\psi = \omega$. Nous pouvons ainsi visualiser la fonction de courant associée au champ de vitesse calculé, ce qui est utile pour l'exploitation des résultats.



Figure 10. Isothermes pour $Q=1$. L'axe de symétrie se trouve à gauche.



Figure 11. Champ de vitesse pour $Q = 1$.



Figure 12. Lignes de courant extraites du champ de vitesse.

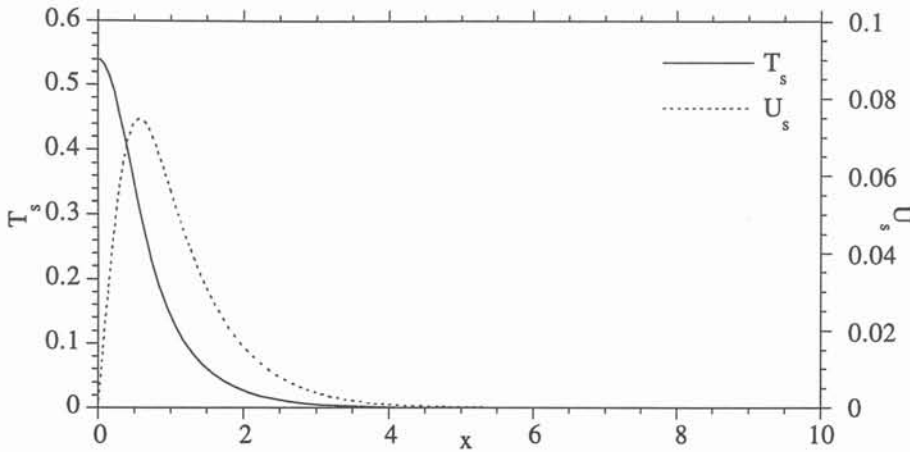


Figure 13. Profils de température (T_s) et de vitesse (U_s) le long de la surface.

- Pour $x \leq a$ le profil de vitesse est pratiquement linéaire, une confrontation avec le modèle analytique de Sanochkin sera donc possible dans cette zone.
- Le champ de température est peu perturbé par les effets de la convection, la forme des isothermes étant proche de celles obtenues pour la diffusion à partir d'un point chaud. En dehors du faisceau le bain est homogène en température.
- La température maximale est atteinte au centre du faisceau. Là encore, une confrontation des modèles analytiques et numériques nous renseignera sur leur validité respective.

6.3.3 Analyse et comparaison des résultats

Plusieurs calculs ont été faits en faisant varier Q de 1 à 10^4 par décade, les autres paramètres étant identiques aux valeurs déjà présentées. Dans chaque cas nous avons relevé la température et la vitesse maximale en surface. Ces données sont comparées avec celles de [Sanochkin 87] et sont présentées dans le tableau 14.

Nous constatons un bon accord général des résultats, notamment pour les faibles valeurs de Q . Les écarts restent de l'ordre de 10 %, aussi bien pour la température que pour la vitesse, et peuvent pour une bonne part être attribués aux différences entre les méthodes numériques.

Tableau 14. Température et vitesse maximale en surface pour différentes valeurs de Q

	Q	1	10	100	10 ³	10 ⁴
T _{max} [*]	Sanochkin	0.48	4.95	44.2	262	1280
	Présent calcul	0.54	5.33	46.7	283	1403
U _{max} [†]	Sanochkin	0.09	0.87	6.22	24.0	81.2
	Présent calcul	0.08	0.80	5.89	22.7	79.2

^{*} unités : $\rho v^2 / \sigma_T h$

[†] unités : v / h

6.4 Comparaison avec le modèle de Chan/Sanochkin

Comme nous l'avons précisé lors de l'exposé de ce modèle, nous devons restreindre son domaine de validité à la zone du faisceau dont la densité de puissance décroît paraboliquement, autrement dit dans l'intervalle $0 \leq x \leq a$. D'autre part, les équations (24) et (25) du modèle analytique font intervenir la quantité $\frac{2\sigma_T q_1}{k\mu v}$. En posant $h = 1$ dans l'expression de Q, nous pou-

$$\text{vons écrire : } Q = \frac{\sigma_T q_0}{k\mu v} = \frac{a^2 \sigma_T q_1}{k\mu v}$$

Nous avons alors l'équivalence des relations (24) et (25) en fonction de Q :

$$T_m = A \frac{q_0}{k} \left(\frac{a^2}{2Q} \right)^{1/4} Pr^{m_T} \quad (30)$$

$$U_x = Bv \sqrt{\frac{2Q}{a^2}} Pr^{m_u} x \quad (31)$$

6.4.1 Vérification du caractère linéaire de la vitesse sous le faisceau

L'équivalent adimensionnel de la relation (27) s'exprime maintenant en fonction de Q :

$$\frac{u^A}{u^B} = \sqrt{\frac{Q^A}{Q^B}} \cdot \frac{r^A}{r^B}, \text{ les exposants A et B étant relatifs à deux faisceaux de caractéristiques}$$

(Q^A, r^A) et (Q^B, r^B) . Nous reportons dans le tableau 15 les valeurs théoriques de ce rapport et celles obtenues par nos calculs en prenant par exemple $Q^A / Q^B = 10$ et en faisant varier Q^B de 1 à 10^3 . Les pentes u' calculées à partir des simulations font intervenir la vitesse maximale en

$$\text{surface et l'abscisse correspondante : } u' = \frac{u_{\max}(x_{\max})}{x_{\max}}$$

Ces valeurs diffèrent très nettement, la pente u' obtenue par le calcul étant toujours supérieure

à celle prédite par le modèle. Cependant, l'accord semble meilleur pour $Q \geq 10^3$, nous auront l'occasion de revenir sur une explication possible au paragraphe 6.5.

Tableau 15. Comparaison entre les pentes théorique et numérique pour différentes valeur de Q^A

Q^A	10	100	10^3	10^4
u' théorique*	3.16	3.16	3.16	3.16
u' numérique	10	6.30	3.85	3.25

* ici u' théorique = $\sqrt{Q^A/Q^B} = \sqrt{10} = 3.16$

6.4.2 Evolution de la température maximale en surface en fonction de Q

La relation (26) est reformulée en fonction de Q : $\theta_{AB} = \left(\frac{Q^A}{Q^B}\right)^{3/4}$

De même que pour la vitesse nous reportons dans le tableau 16 les valeurs théoriques de θ_{AB} et celles calculées à partir des données du tableau 14.

Tableau 16. Comparaison entre θ_{AB} théorique et calculé pour différentes valeur de Q^A

Q^A	10	100	10^3	10^4
θ_{AB} théorique	5.62	5.62	5.62	5.62
θ_{AB} numérique	9.87	8.76	6.06	4.97

Là encore les simulations et le modèle ne concordent pas, mais pour les valeurs élevées de Q l'accord est, comme pour la vitesse, meilleur.

6.5 Analyse des résultats

Les modèles analytiques de Chan et Sanochnik font l'hypothèse d'une couche limite thermique et visqueuse mais ne précise pas dans quelles conditions celles-ci existent. De ce fait, si les simulations ne permettent pas le développement de ces couches, l'écoulement thermocapillaire en surface et celui de cœur ne sont pas indépendants. Pour savoir si nous vérifions cette hypothèse, nous avons calculé leurs épaisseurs δ_k et δ_v à partir des résultats de simulation. Ces données sont reportées dans le tableau 17, ainsi que leur rapport puisque le modèle analytique prédit que $\delta_k/\delta_v \sim \text{Pr}^{-1} = 1$. Dans le cas de la couche limite thermique nous voyons que, pour les faibles valeur de Q , δ_k est de l'ordre de $h/2$, ce qui est insuffisant pour garantir l'hypothèse d'un écoulement de cœur découplé de celui de surface. Remarquons que pour $Q > 10^3$ celle-ci

diminue fortement, le rapport des épaisseurs se rapprochant de la valeur théorique.

Tableau 17. Epaisseur des couches limites thermique et cinématique pour différentes valeurs de Q

Q	1	10	100	10^3	10^4
δ_k	0.548	0.540	0.472	0.285	0.142
δ_v	0.164	0.164	0.179	0.165	0.130
δ_k / δ_v	3.3	3.3	2.6	1.7	1.1

Ce comportement, ajouté au fait que δ_v varie peu avec Q et que les résultats des tableaux 15 et 16 sont meilleurs pour Q élevé, nous indique que le modèle analytique prédit mal le couplage avec le champ de température pour les faibles puissances. En effet, dans ce cas les vitesses induites par les forces thermocapillaires sont faibles et leur influence sur le champ de température négligeable : nous sommes donc dans une situation dominée par la diffusion où la température décroît presque hyperboliquement avec x et y . Nous pouvons tout de même essayer d'améliorer les résultats, par exemple en augmentant h ou, ce qui revient au même, en diminuant le rayon a du faisceau.

Nous avons donc repris les calculs précédents avec $a = 0.1$. Cette diminution devant s'accompagner d'une adaptation du maillage, les nouveaux calculs ont été effectués sur une grille 60×30 . Les résultats sont résumés dans le tableau 18. L'épaisseur de la couche limite thermique est maintenant nettement plus petite, mais le rapport δ_k / δ_v est quasiment identique aux calculs pour $a = 0.5$ puisque l'épaisseur de la couche limite visqueuse a diminué dans le même rapport. Nous pouvons donc écarter un problème lié aux conditions de calcul et chercher un changement de régime dans l'écoulement.

Tableau 18. Résultats pour $a = 0.1$

Q	1	10	50	100	500	10^3	$5 \cdot 10^3$	10^4
T_m	0.18	1.75	9.41	18.50	79.80	139	426	670
U_{\max}	0.03	0.28	1.43	2.77	10.9	17.9	49.7	74.5
r_{\max}	0.16	0.16	0.16	0.16	0.16	0.16	0.16	0.16
δ_k	0.182	0.181	0.194	0.191	0.164	0.143	0.087	0.068
δ_v	0.068	0.069	0.070	0.070	0.068	0.066	0.058	0.054
δ_k / δ_v	2.8	2.6	2.8	2.7	2.4	2.1	1.5	1.2

6.6 Mise en évidence d'un nombre de Marangoni critique

6.6.1 Pour la température maximale en surface

Si nous utilisons les données du tableau 18 pour tracer la courbe $T_{\max} = f(Q)$, nous pouvons voir figure 14 que pour les faibles valeurs de Q , $T_{\max} \propto Q$ et que $T_{\max} \propto Q^{0.71}$ lorsque Q est élevé, la transition s'effectuant pour $Q_c \approx 500$. Cette valeur correspond dans le tableau 18 à une chute du rapport des épaisseurs des couches limites vers la valeur prévue par le modèle analytique. De plus, le coefficient 0.71 trouvé par interpolation est assez proche de la valeur 0.75 attendue : le modèle de Chan et Sanochkin décrit donc correctement le champ de température pour $Q > Q_c$. Dans le cas des faibles valeurs de Q , il semble que champ de vitesse et champ de température soient découplés, comme on peut le voir figure 15. En effet, jusqu'à $Q \approx 1000$ les isothermes ne change pas qualitativement de forme, et suggèrent un comportement diffusif.

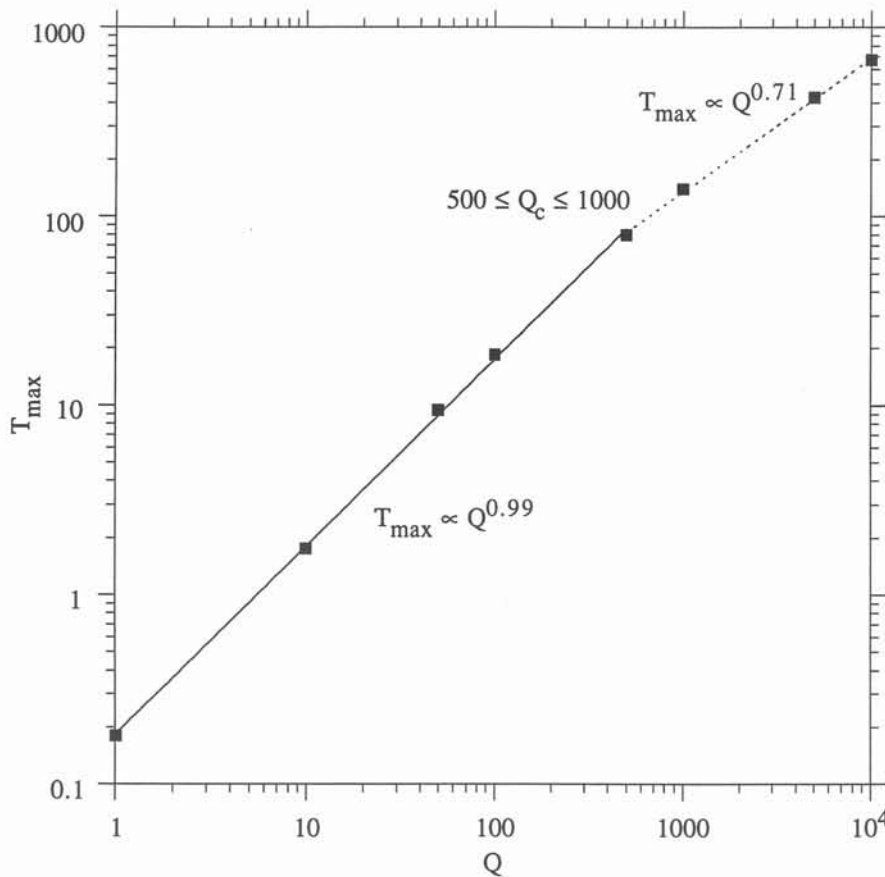


Figure 14. Température maximale en fonction de Q pour $a = 0.1$: mise en évidence d'un changement de régime d'écoulement

Avec cette hypothèse, le champ de température en surface est grossièrement donné par une relation de la forme $k \frac{\partial T}{\partial y} = q(x)$ qui permet de supposer que $T_{\max} \propto q_0 \propto Q$. Nous retrouvons ainsi la valeur 1 obtenue par interpolation des résultats de simulation.

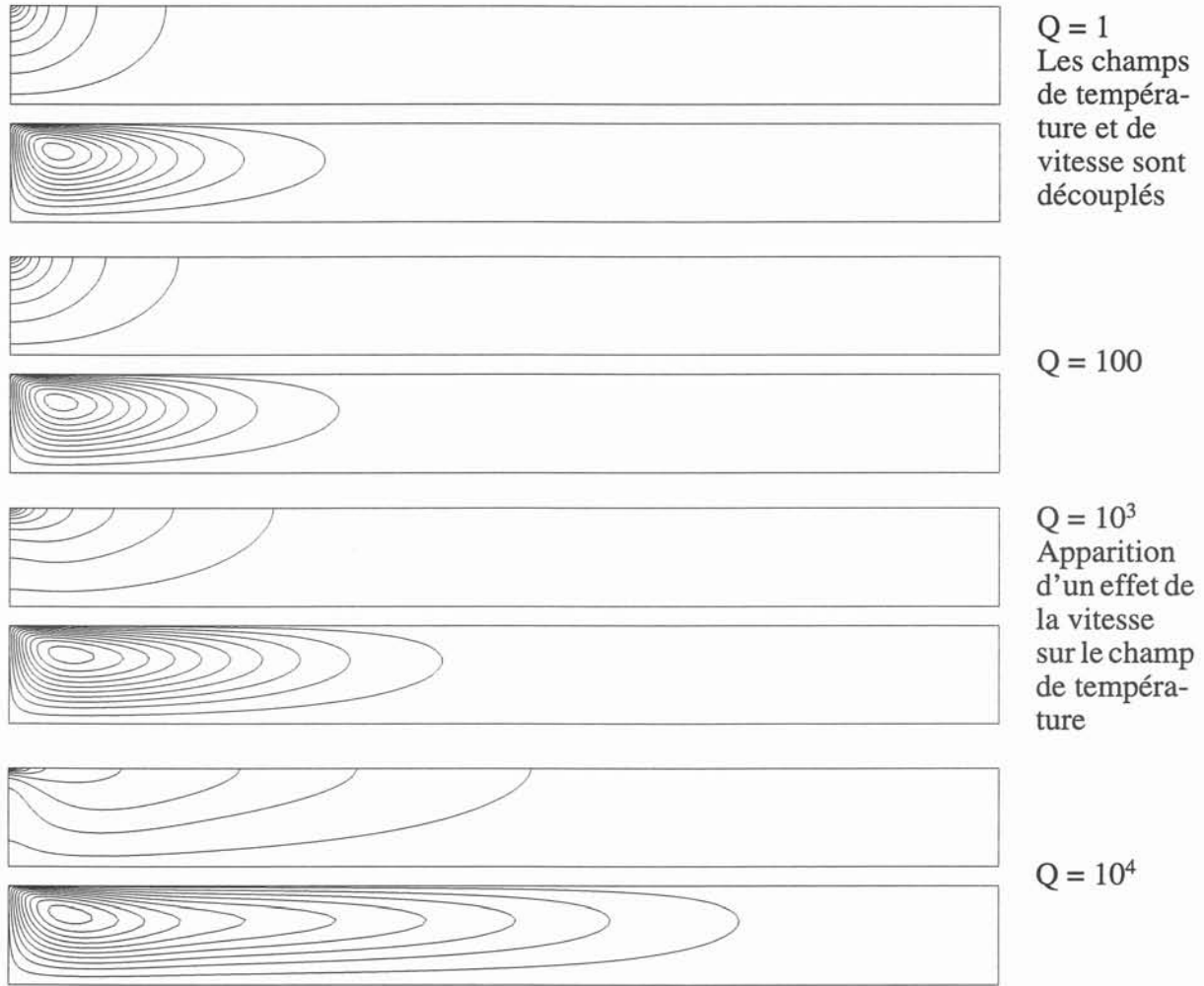


Figure 15. Champ de température et lignes de courant pour différentes valeurs de Q ($a = 0.1$). Chaque isoaleur représente $1/10^6$ de l'écart maximum.

6.6.2 Pour la vitesse maximale en surface

La même démarche, appliquée à la pente maximale de la vitesse en surface permet de tracer (figure 16) la courbe $u'_{max} = U_{max}/r_{max} = f(Q)$. Pour les fortes valeurs de Q nous avons $u'_{max} \propto Q^{0.64}$ tandis que $u'_{max} \propto Q^{0.96}$ pour les faibles valeurs de Q , le changement de régime s'effectuant là aussi pour $Q_c \approx 500$.

Le modèle analytique prévoit $u'_{max} \propto Q^{0.5}$, la valeur 0.64 trouvée est assez proche de cette valeur théorique, mais l'écart est plus important que dans le cas de la température. Nous expliquons cet écart par l'augmentation du couplage vitesse-température en surface avec Q puisque ce paramètre est de la forme Ma / Pr dans lequel le nombre de Marangoni Ma traduit l'importance de la convection d'origine thermocapillaire par rapport à la conduction. Nous pouvons ainsi fixer le domaine de validité pour le modèle analytique tel qu'il est présenté :

$$Q_c \approx 500 \leq Q \leq 10^4$$

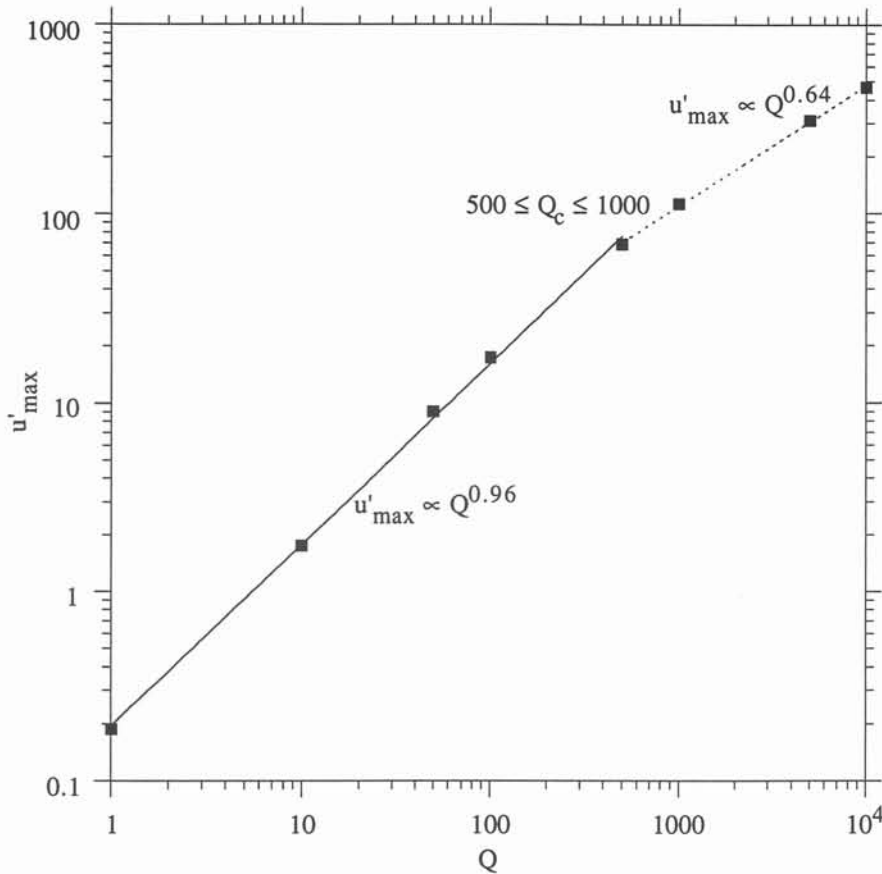


Figure 16. Pente maximale de la vitesse en surface en fonction de Q et $a = 0.1$: mise en évidence d'un changement de régime d'écoulement.

Notons que le calcul de la pente à l'origine u'_{\max} devient moins précis lorsque Q augmente car le profil de vitesse perd un peu de son caractère linéaire sous le faisceau. On peut aussi supposer que le maillage influence fortement la précision des résultats puisque la vitesse maximale en surface est multipliée par un facteur 2600 lorsqu'on passe de $Q = 1$ à $Q = 10^4$. Les gradients sont proportionnellement plus importants puisque le maillage est le même dans tous les calculs. En toute rigueur il faudrait diminuer dans la même proportion la taille des mailles, mais cela conduirait à des maillages et des temps de calcul trop importants.

6.7 Conclusions sur le modèle de Chan et Sanochkin

Nous venons de voir que les modèles analytiques proposés par Chan puis Sanochkin reproduisent bien le comportement thermohydraulique sous le faisceau, sous réserve que le paramètre Q soit suffisamment grand. La présence de régimes d'écoulements différents (écoulement type visqueux à faible valeur de Q , en couche limite au-delà de Q_c) indique clairement qu'il doit exister une adimensionnalisation plus satisfaisante faisant apparaître l'équivalent d'un nombre de Reynolds pour les écoulements thermocapillaires.

Cette étude fait l'objet du chapitre suivant où nous nous proposons d'étudier le cas des liquides à faible nombre de Prandtl et une géométrie axisymétrique afin de nous rapprocher des conditions les plus répandues en métallurgie d'élaboration.

7 Modèle complet à grand nombre de Reynolds de l'effet thermocapillaire

L'étude précédente nous a montré la nécessité d'une meilleure adimensionnalisation pour les écoulements thermocapillaires, en particulier nous proposons à la place du paramètre Q un nombre de Reynolds thermocapillaire Re_σ et une étude en ordre de grandeur basée sur ce nombre. L'adimensionnalisation proposée suit celle d'Ostrach [Ostrach 82] étendue à une géométrie axisymétrique et sera confrontée aux résultats obtenus par notre modèle numérique.

7.1 Analyse en ordre de grandeur

Nous nous intéressons ici à une géométrie axisymétrique de rayon L et de profondeur D telle que celle décrite figure 17.

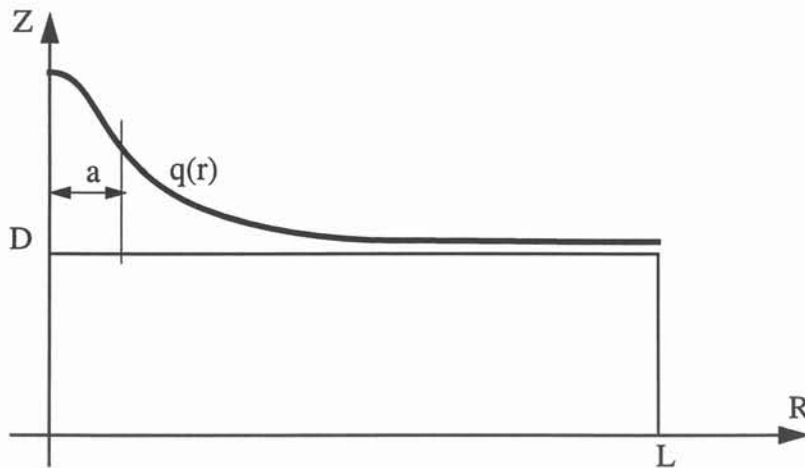


Figure 17. Géométrie et principales dimensions utilisées pour l'étude globale de l'écoulement engendré par l'effet thermocapillaire

Par la suite nous noterons (R, Z, U, V, T, P) les variables principales et (r, z, u, v, θ, p) leur équivalent adimensionnel. Les équations du mouvement (continuité, quantité de mouvement et énergie) sont les suivantes :

$$\frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial R} (RU) + \frac{\partial V}{\partial Z} = 0$$

$$U \frac{\partial U}{\partial R} + V \frac{\partial U}{\partial Z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial R} + \nu \left(\Delta_R U - \frac{U}{R^2} + \Delta_Z U \right)$$

$$U \frac{\partial V}{\partial R} + V \frac{\partial V}{\partial Z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial Z} + \nu (\Delta_R V + \Delta_Z V) + \rho_0 \beta |g_Z| (T - T_0)$$

$$U \frac{\partial T}{\partial R} + V \frac{\partial T}{\partial Z} = \alpha (\Delta_R T + \Delta_Z T) \quad \text{avec : } \Delta_R = \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial R} \left(R \frac{\partial}{\partial R} \right) \quad \Delta_Z = \frac{\partial^2}{\partial Z^2}$$

Les conditions aux limites associées sont données par :

$$U(0, Z) = \frac{\partial V}{\partial R}(0, Z) = U(L, Z) = V(L, Z) = U(R, 0) = V(R, 0) = 0$$

$$\mu \frac{\partial U}{\partial Z}(R, D) = -\sigma_T \frac{\partial T}{\partial R}(R, D) \quad V(R, D) = 0 \quad (32)$$

$$\frac{\partial T}{\partial R}(0, Z) = 0 \quad T(L, Z) = T(R, 0) = T_0 \quad \kappa \frac{\partial T}{\partial Z}(R, D) = Q_0 e^{-\frac{r^2}{a^2}}$$

7.1.1 Formulation adimensionnelle

Les quantités suivantes sont utilisées comme références : L , D , U_R , V_R , P_R et ΔT . Nous noterons $A = D / L$ le rapport d'aspect de la cavité et $B = L / a$ l'indice de focalisation.

Le rayon caractéristique du faisceau étant a , nous prendrons comme référence de température

$$\Delta T = \frac{Q_0 a}{\kappa} = \frac{P}{\pi a \kappa} \quad \text{et nous noterons } Gr = \frac{\beta g \Delta T a^3}{\nu^2} \quad \text{le nombre de Grashof formé à l'aide de}$$

cette différence. La vitesse de référence U_R est obtenue par la condition thermocapillaire (32) en surface écrite à l'aide des quantités adimensionnelles :

$$\frac{\partial u}{\partial z} = - \frac{\sigma_T \Delta T A}{\mu U_R} \frac{\partial \theta}{\partial r}$$

Pour que l'équilibre des contraintes soit réalisé en surface ces deux termes doivent être du même ordre de grandeur, ce qui implique :

$$U_R = \frac{|\sigma_T| \Delta T}{\mu} A \quad (33)$$

Le nombre de "Reynolds thermocapillaire" formé avec cette vitesse s'écrit :

$$Re_\sigma = \frac{U_R L}{\nu} = \frac{|\sigma_T| \Delta T D}{\mu \nu} \quad (34)$$

Lorsque $A \neq 1$ il est intéressant de considérer le nombre de Reynolds effectif $A^2 Re_\sigma$, nombre pertinent dans les écoulements de type "lubrification".

7.1.2 Écoulement visqueux : $A^2 Re_\sigma \ll 1$

Dans l'hypothèse d'un écoulement visqueux, les contraintes en surface pénètrent dans le fluide par action de la viscosité et D est l'échelle de longueur adéquate selon Z . L'équation de continuité permet alors d'écrire $V_R = AU_R$ et la pression de référence est donnée par $\mu U_R L / D^2$ plutôt que ρU_R^2 . Les équations du mouvement et de l'énergie s'écrivent maintenant :

$$\begin{aligned} 0 &= -\frac{\partial p}{\partial r} + A^2 \left(\Delta_r u - \frac{u}{r^2} \right) + \Delta_z u \\ 0 &= -\frac{1}{A^2} \frac{\partial p}{\partial z} + A^2 \Delta_r v + \Delta_z v + \frac{AB^3 Gr}{Re_\sigma} \theta \\ A^2 Ma \left(u \frac{\partial \theta}{\partial r} + v \frac{\partial \theta}{\partial z} \right) &= A^2 \Delta_r \theta + \Delta_z \theta \end{aligned}$$

dans laquelle le nombre de Marangoni Ma a pour expression $Ma = Pr Re_\sigma$

7.1.3 Écoulement en couche limite : $A^2 Re_\sigma \gg 1$

Écoulement de surface

Pour un nombre de Reynolds suffisamment grand une couche limite apparaît en surface et son épaisseur δ est l'échelle de longueur appropriée. Nous noterons par la suite U_s et Re_s les quantités concernant la couche limite. Les vitesses et la pression de référence ont pour expression :

$$U_s = \frac{|\sigma_T| \Delta T \delta}{\mu L} \quad V_s = U_s \frac{\delta}{L} \quad P_s = \rho U_s^2$$

L'équilibre des termes d'inertie et des contraintes dans l'équation pour u conduit à une estimation du rapport $\frac{\delta}{L} = \frac{1}{\sqrt{Re_s}} = \left(\frac{\nu}{U_s L} \right)^{1/2}$

La vitesse de référence en surface a donc pour expression : $U_s = \left(\frac{\sigma_T^2 \Delta T^2 \nu}{\mu^2 L} \right)^{1/3}$

Nous avons alors d'après (34) la correspondance suivante : $A^2 Re_s = (A^2 Re_\sigma)^{2/3}$ (35)

Les équations s'écrivent maintenant :

$$\begin{aligned}
u \frac{\partial u}{\partial r} + v \frac{\partial u}{\partial z} &= -\frac{\partial p}{\partial r} + \frac{A^2}{(A^2 Re_\sigma)^{2/3}} \left(\Delta_r u - \frac{u}{r^2} \right) + \Delta_z u \\
u \frac{\partial v}{\partial r} + v \frac{\partial v}{\partial z} &= -\frac{(A^2 Re_\sigma)^{2/3}}{A^2} \frac{\partial p}{\partial z} + \frac{A^2}{(A^2 Re_\sigma)^{2/3}} \Delta_r v + \Delta_r v + \frac{AB^3 Gr}{Re_\sigma} \theta \\
Pr \left(u \frac{\partial \theta}{\partial r} + v \frac{\partial \theta}{\partial z} \right) &= \frac{A^2}{(A^2 Re_\sigma)^{2/3}} \Delta_r \theta + \Delta_z \theta
\end{aligned} \tag{36}$$

Écoulement de cœur

Pour l'analyse de l'écoulement de cœur D est à nouveau l'échelle pertinente mais les références de vitesse et de pression (notées avec un indice c) sont déduites de la conservation du débit entre la couche limite et l'écoulement de cœur, autrement dit nous supposons que :

$$U_c D = U_s \delta \quad V_c = V_s \quad P_c = \rho U_c^2$$

Le nombre de Reynolds correspondant à cette vitesse de référence vérifie maintenant :

$$A^2 Re_c = (A^2 Re_\sigma)^{1/3}$$

Les équations pour cette région sont similaires aux précédentes :

$$\begin{aligned}
u \frac{\partial u}{\partial r} + v \frac{\partial u}{\partial z} &= -\frac{\partial p}{\partial r} + \frac{1}{(A^2 Re_\sigma)^{1/3}} \left(A^2 \left(\Delta_r u - \frac{u}{r^2} \right) + \Delta_z u \right) \\
u \frac{\partial v}{\partial r} + v \frac{\partial v}{\partial z} &= -\frac{1}{A^2} \frac{\partial p}{\partial z} + \frac{1}{(A^2 Re_\sigma)^{1/3}} (A^2 \Delta_r v + \Delta_z v) + \frac{AB^3 Gr}{Re_\sigma} \theta \\
Pr (A^2 Re_\sigma)^{1/3} \left(u \frac{\partial \theta}{\partial r} + v \frac{\partial \theta}{\partial z} \right) &= A^2 \Delta_r \theta + \Delta_z \theta
\end{aligned} \tag{37}$$

7.1.4 Influence de la convection naturelle

L'importance relative des forces de convection thermogravitaire est donnée par le groupement contenant le nombre Grashof. Il est intéressant d'exprimer cette quantité en faisant apparaître le nombre de Bond dynamique Bd qui représente le rapport entre les forces de gravité et d'origine thermocapillaire :

$$\frac{AB^3 Gr}{Re_\sigma} = \frac{\rho \beta g L^2}{\sigma_T} = \left(\frac{\rho g L^2}{\sigma_T \Delta T} \right) \beta \Delta T = Bd \beta \Delta T$$

Dans le cas d'un écoulement en couche limite, cette expression doit être comparée au gradient de pression qui est le terme de plus haut degré dans l'équation de ν , nous avons alors :

$$\left(\frac{A}{Re_\sigma}\right)^{5/3} B^3 Gr = Bd \left(\frac{A}{Re_\sigma}\right)^{2/3} \beta \Delta T$$

Cette relation montre que pour des nombres de Reynolds suffisamment grands, l'effet thermocapillaire peut masquer complètement l'influence de la convection naturelle, celle-ci n'affectant dans ce cas que l'écoulement de cœur.

7.1.5 Caractéristiques d'un écoulement thermocapillaire à grand nombre de Reynolds et faible nombre de Prandtl

Si nous examinons l'équation de l'énergie dans les systèmes (36) et (37) nous constatons que l'importance relative des flux de convection et de conduction exprimés par le nombre de Peclet est différente dans la couche limite et dans l'écoulement de cœur :

- $Pe = Pr$ en surface
- $Pe = Pr (A^2 Re_\sigma)^{1/3}$ en volume

Pour les métaux liquides $Pr \ll 1$ et la convection est négligeable dans la couche limite : la distribution de température en surface n'est pas perturbée par l'écoulement thermocapillaire généré à la surface libre. En revanche, c'est l'écoulement de cœur qui peut modifier le champ de température si la condition $Pr (A^2 Re_\sigma)^{1/3} > 1$ est remplie. Ce fait remarquable caractérise les écoulements thermocapillaires à faible nombre de Prandtl et conduit à de nombreuses configurations d'écoulement selon la géométrie de la cavité (paramètre A) et les caractéristiques de faisceau (nombre de Reynolds Re_σ , focalisation B). Dans tous les cas, nous nous attendons à l'existence de deux régions aux caractéristiques thermiques et hydrauliques distinctes.

7.2 Modélisation — application au mercure

Nous avons choisi de vérifier les lois d'échelle proposées en prenant comme fluide du mercure, prototype des métaux liquides à faible nombre de Prandtl, et en faisant varier le nombre de Reynolds thermocapillaire par modification de la puissance et de la focalisation du faisceau.

7.2.1 Choix des paramètres

La cavité modélisée est un cylindre de 3 cm de profondeur et de 10 cm de rayon soit un rapport d'aspect $A = 0.3$. Nous désirons atteindre des nombres de Reynolds élevés et examiner les cas où la convection naturelle et les effets thermocapillaires sont tour à tour prépondérants.

Si nous exprimons les vitesses caractéristiques (U_g pour la convection thermogravitaire et U_s pour l'effet thermocapillaire) en fonction de la puissance P et de la focalisation a du faisceau nous avons :

$$U_g = \frac{v}{a} \sqrt{Gr} = \sqrt{\frac{\beta g}{\pi \kappa}} \sqrt{P} \quad U_s = \left(\frac{\sigma_T^2 \Delta T^2 v}{\mu^2 L} \right)^{1/3} = \left(\frac{\sigma_T^2 v}{\pi^2 \mu^2 \kappa^2 L} \right)^{1/3} \left(\frac{P}{a} \right)^{2/3}$$

et leur rapport :

$$\frac{U_s}{U_g} = \left(\frac{\sigma_T^2 v}{\pi^2 \mu^2 \kappa^2 L} \right)^{1/3} \sqrt{\frac{\pi \kappa}{\beta g}} P^{1/6} a^{-2/3} \approx 3.4812 \times 10^{-2} P^{1/6} a^{-2/3}$$

Nous constatons que la vitesse caractéristique de la convection naturelle ne dépend que de la puissance, alors que pour l'effet thermocapillaire puissance et focalisation interviennent.

Nous avons tracé figure 18 le rapport U_s/U_g en coordonnées logarithmiques pour deux focalisations ($a = 0.5$ et 1 cm) en faisant varier la puissance de 1 à 100 W. Pour la gamme de variation de ces paramètres nous constatons que les effets thermocapillaires dominent aux fortes puissances et focalisations et que les effets de la convection naturelle ne seront pas négligeables aux faibles puissances.

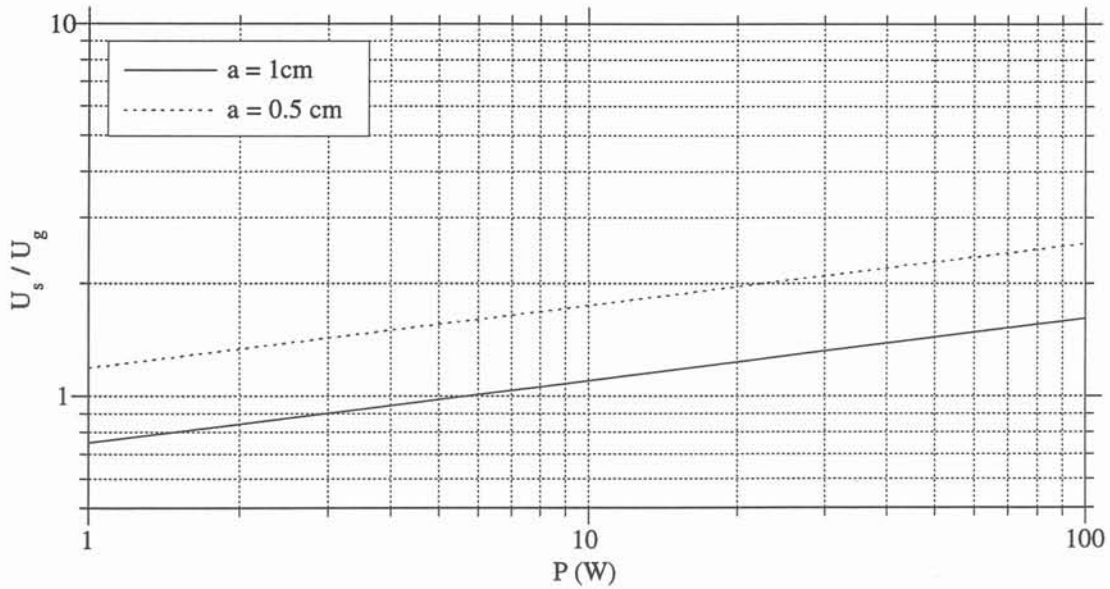


Figure 18. Evolution du rapport U_s/U_g en fonction de la puissance pour différentes focalisations

7.2.2 Vérification des lois d'échelle pour l'effet thermocapillaire

Nous avons modélisé la cavité avec un maillage 50×30 devenant plus dense vers les parois. Le critère de convergence pour la température est $\max(|\Delta T|) < 0.01$ et pour la vitesse

$\frac{\sum |R_p|}{N} < 10^{-9}$ dans laquelle R_p est le résidu de pression de l’algorithme SCGS défini par (20)

et N le nombre total de volumes de contrôle de la pression. Avec ces données, nous reportons dans le tableau 19 les différentes valeurs du nombre de Reynolds et la vitesse maximale en surface.

Tableau 19. Principaux résultats pour la modélisation de l’effet thermocapillaire sur du mercure

a (cm)	1				0.5			
P (W)	1	10	50	100	1	10	50	100
$A^2 Re_\sigma^*$	$8.15 \cdot 10^4$	$8.15 \cdot 10^5$	$4.08 \cdot 10^6$	$8.15 \cdot 10^6$	$1.63 \cdot 10^4$	$1.63 \cdot 10^5$	$8.15 \cdot 10^6$	$1.63 \cdot 10^6$
U_{\max} (cm/s)	0.59	2.75	6.6	9.8	1.4	6.4	11.4	20.6

* Avec les données physiques du mercure nous avons $A^2 Re_\sigma = 81.5 \frac{P}{a}$

Nous comparons sur le graphique de la figure 19 le nombre de Reynolds calculé à partir de la vitesse maximale en surface avec les lois d’échelle pour le modèle de couche limite

$A^2 Re_\sigma = \left(A^2 \frac{U_{\max} L}{\nu} \right)^{1/2}$ et la relation (35). Ces résultats montrent que l’adimensionnalisation proposée est satisfaisante pour des nombres de Reynolds élevés et que la vitesse de référence U_s est une bonne échelle en surface.

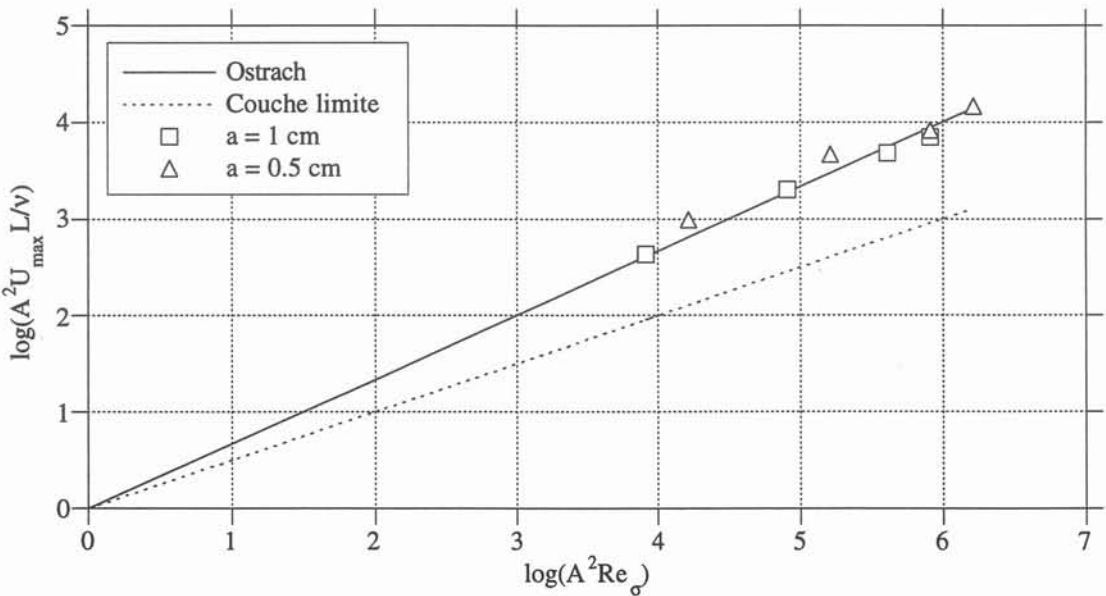


Figure 19. Vérification des lois d’échelle pour des nombres de Reynolds élevés

7.2.3 Importance relative de la convection naturelle et de l'effet thermocapillaire

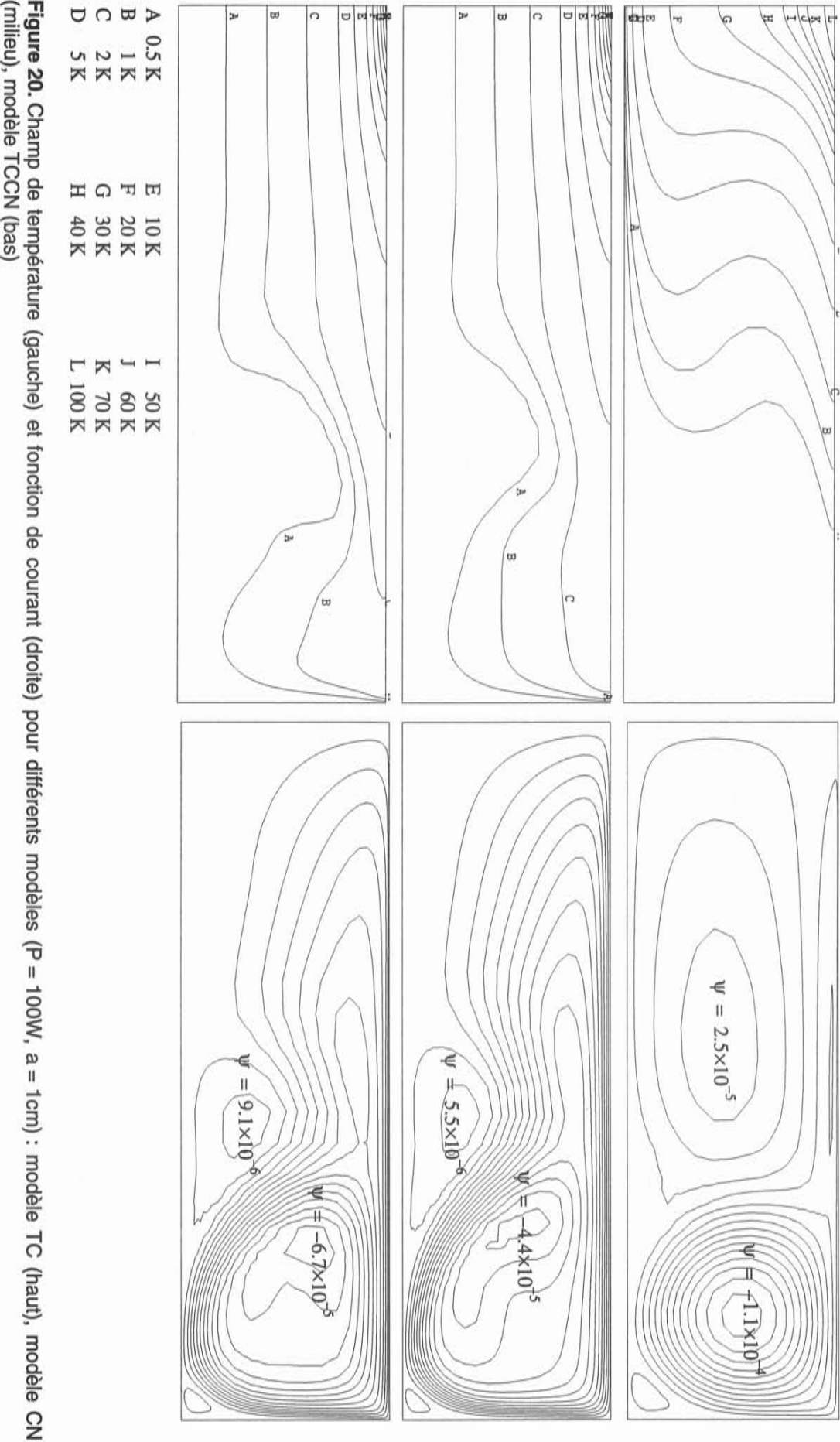
Nous avons effectué trois types de simulation pour diverses puissances et focalisations, dans la première seul l'effet thermocapillaire est pris en compte (modèle *TC*), dans la seconde il n'y a que les forces d'origine thermogravitaire (modèle *CN*), et dans la dernière nous avons pris en compte simultanément tous ces effets (modèle *TCCN*).

Nous analysons ici deux cas représentatifs, l'un à convection thermocapillaire dominante ($P = 100W$, $a = 1cm$), l'autre à convection naturelle dominante ($P = 1W$, $a = 1cm$).

Configurations d'écoulement lorsque l'effet thermocapillaire domine ($P = 100W$)

Les lignes de courant et champ de température sont présentés figure 20 pour les trois modèles.

- Dans le cas de l'effet thermocapillaire il existe deux cellules bien identifiées, le vortex principal est issu de l'interaction entre l'écoulement surfacique et la paroi latérale, le second est créé par conservation de la quantité de mouvement. L'effet du courant de retour de cette recirculation secondaire est visible sur le champ de température puisque les isothermes sont notablement déformées dans cette région. Cet aspect de l'écoulement est en accord avec l'analyse faite au paragraphe 7.1.5 puisque nous avons dans le cœur $Pr(A^2 Re_\sigma)^{1/3} \sim 4 > 1$. Etant donné que nous sommes dans une configuration à nombre de Reynolds élevé et que le tourbillon principal est formé de lignes de courant fermées, nous pouvons supposer que le théorème de Batchelor (voir [Batchelor 67]) pour les écoulements permanents en régime laminaire s'applique dans cette région, autrement dit nous devons vérifier que $\frac{\partial p^*}{\partial \psi} = -\omega_c$ avec $p^* = \frac{p}{\rho} + \frac{1}{2}u^2$ la pression modifiée, ψ la fonction de courant et ω_c la vorticit  au c ur du tourbillon. La figure 21 nous permet de valider cette hypoth se puisque, en dehors des couches limites, la vorticit  le long d'une verticale traversant le tourbillon est pratiquement constante et que cette valeur est confirm e par interpolation sur la partie lin aire du graphe $p^* = f(\psi)$.
- Lorsque la convection naturelle seule est prise en compte, d'importantes modifications ont lieu dans la r gion du faisceau, zone d'influence des forces d'Archim de. Nous constatons tout d'abord que la recirculation secondaire est bien moins active que la premi re et ne perturbe pas le champ de temp rature, contrairement   la cellule principale. La diff rence majeure avec un  coulement thermocapillaire, outre une couche limite en surface moins marqu e, vient de l'apport sous le faisceau de fluide froid depuis le fond de la cavit , ce qui entra ne le tassement des isothermes en surface.



- Dans le modèle complet nous retrouvons en quelque sorte une superposition de ces caractéristiques puisque la convection naturelle et l'effet thermocapillaire agissent sur des zones différentes du fluide. Nous avons donc un écoulement similaire au modèle CN sous le faisceau et une couche limite en surface proche de celle obtenue avec le modèle TC.

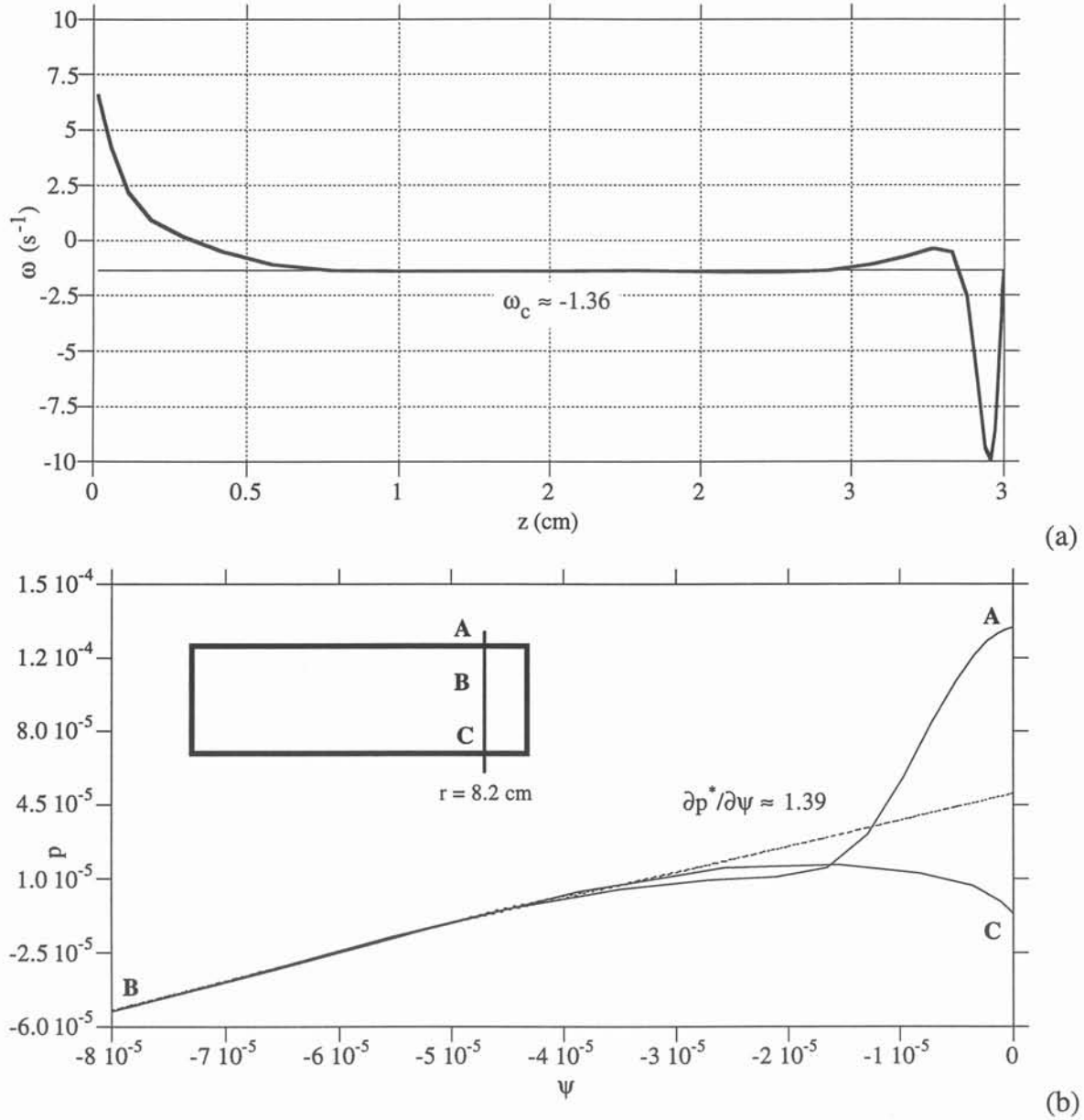


Figure 21. Vérification du modèle de Batchelor au centre du vortex principal : $\frac{\partial p^*}{\partial \psi} \approx -\omega_c$

(a) vorticité le long d'une verticale ($r = 8.2$ cm), (b) pression modifiée en fonction de ψ

Ces modifications sont clairement visibles sur les profils présentés figure 22. Ces courbes montrent bien que la convection naturelle contrôle globalement le champ de température, mais que l'effet thermocapillaire reste le moteur de l'écoulement en surface.

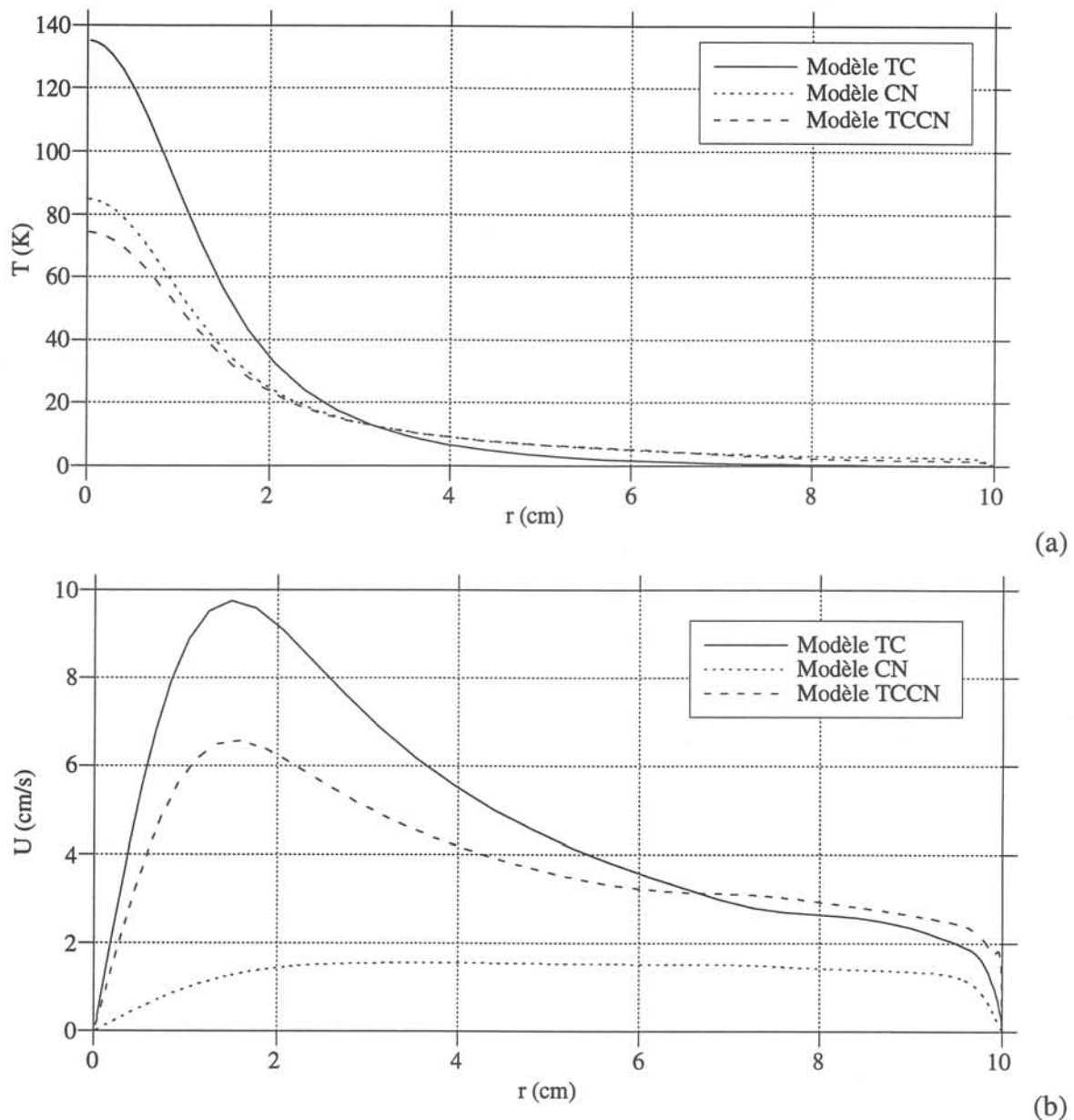


Figure 22. Profils surfaciques de température (a) et de vitesse (b) pour différents modèles ($P = 100W$, $a = 1cm$)

Configurations d'écoulement lorsque la convection naturelle domine ($P = 1W$)

Les lignes de courant et champ de température sont présentés figure 23 pour les trois modèles. A l'évidence, mis à part un resserrement des lignes de courant dans la couche limite en surface, il n'y a pas de différence notable entre les modèles avec et sans effet Marangoni. Comme précédemment, nous constatons sur les profils de la figure 24 que le champ de température est contrôlé par la convection naturelle. Remarquons aussi que les vitesses maximales en surface avec et sans convection naturelle sont du même ordre de grandeur, comme prédit par l'analyse faite au paragraphe 7.2.1

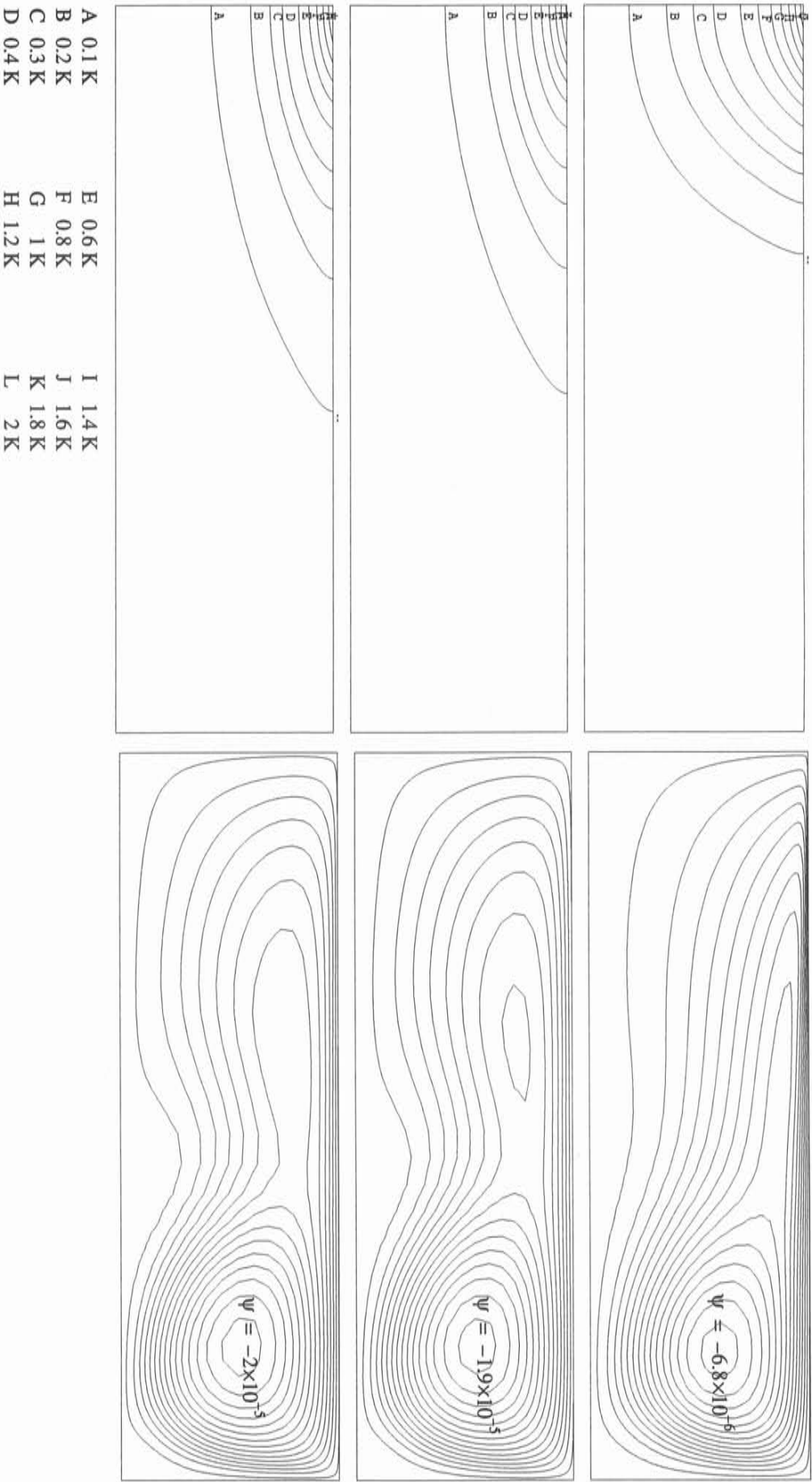


Figure 23. Champ de température (gauche) et fonction de courant (droite) pour différents modèles ($P = 1\text{ W}$, $a = 1\text{ cm}$) : modèle TC (haut), modèle CN (milieu), modèle TCCN (bas)

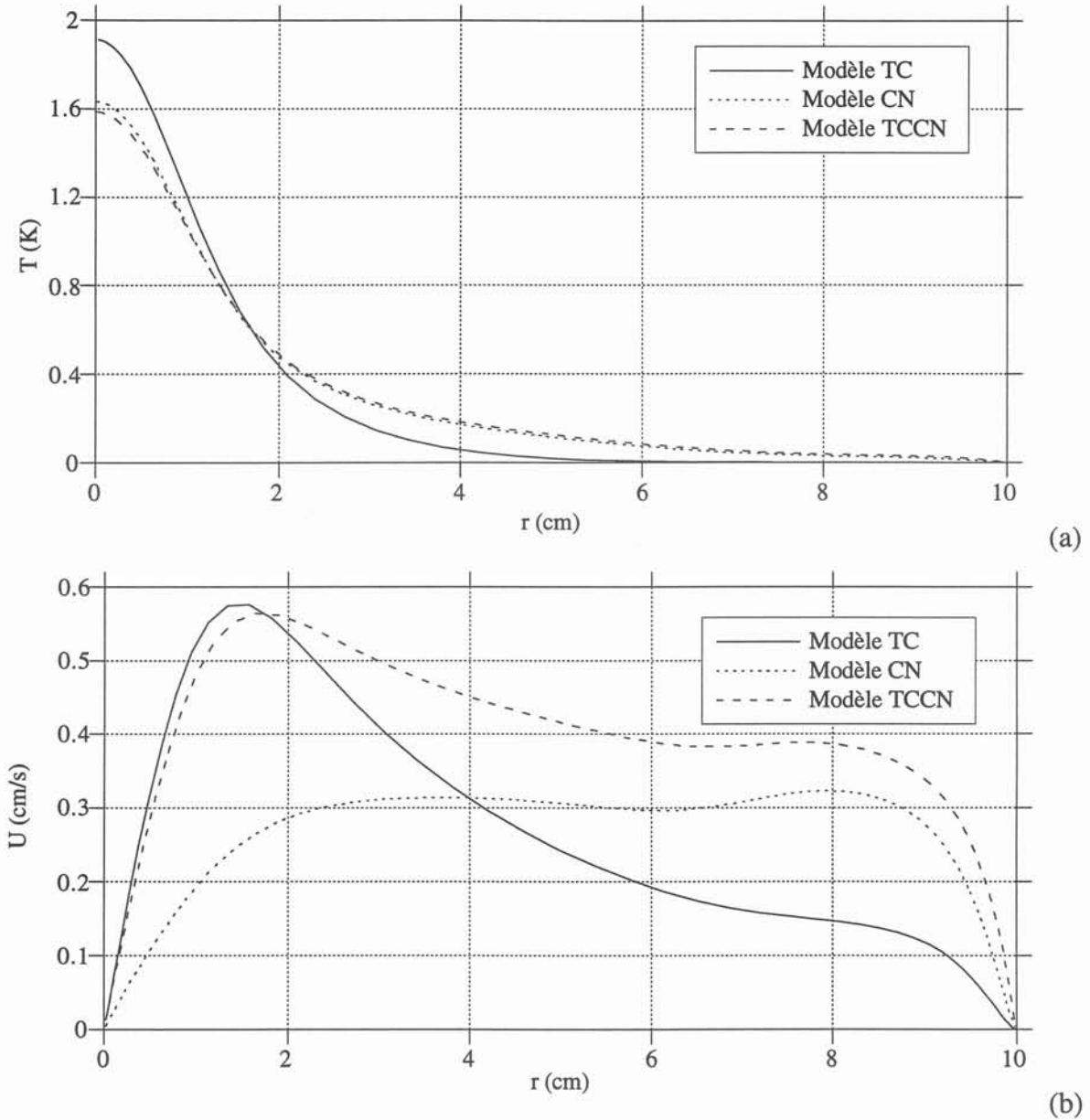


Figure 24. Profils de température (a) et de vitesse (b) pour différents modèles ($P = 1W$, $a = 1cm$)

7.3 Déformation de la surface libre

On peut s'interroger au vu des profils de pression de la figure 25 sur l'hypothèse d'une surface plane et rigide.

En effet, la composante tangentielle de la contrainte de cisaillement induite par l'effet thermo-capillaire est prise en compte par notre modèle, mais pour la composante normale nous avons seulement imposé une vitesse nulle. Or, la condition à satisfaire dans le cas d'une surface libre est la continuité de la contrainte normale, soit ici (l'air au-dessus de la surface étant traité comme un vide parfait) :

$$\tau_{nn} - p + p_a + p_{ref} = -\sigma \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right)$$

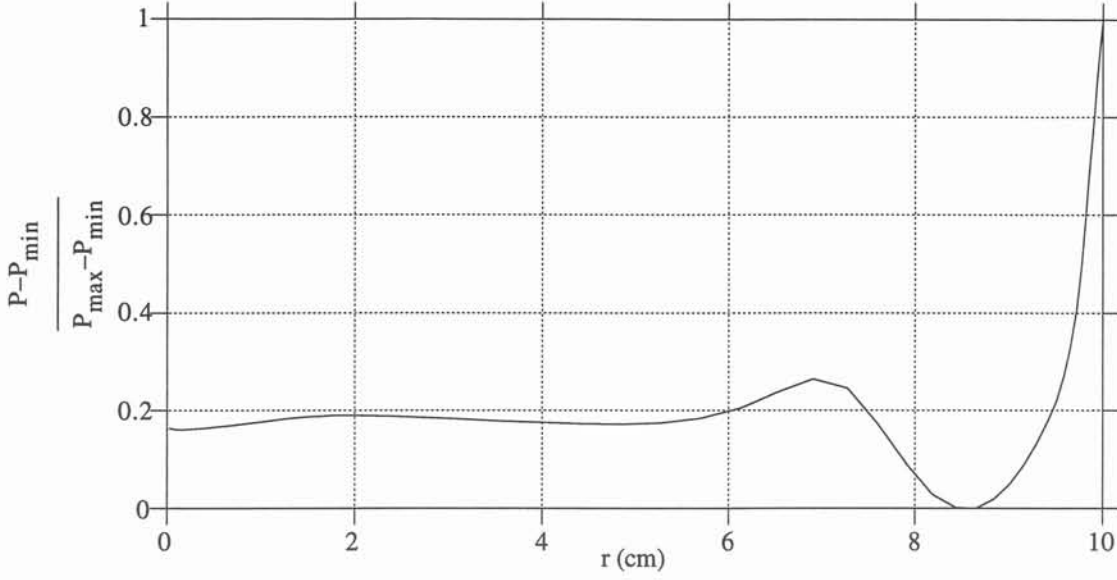


Figure 25. Profil de la pression normalisée pour $P = 50W$ et $a = 1cm$. Des courbes similaires sont obtenues pour l'ensemble des simulations.

avec n la direction de la normale à la surface, p_a la pression ambiante, σ la tension superficielle et R_1, R_2 les rayons de courbure principaux et p_{ref} une pression de référence.

Cette équation est en général pratiquement vérifiée pour des écoulements sans couche limite pour lesquels les gradients de pression transverses sont négligeables. Dans notre cas deux éléments nous permettent de supposer que nous ne vérifions pas ces hypothèses : la présence d'une couche limite et le point d'arrêt imposé au jet de surface sur la paroi latérale qui doit nécessairement générer des gradients de pression.

Nous avons donc introduit dans notre procédure numérique une méthode de calcul de la déformation de la surface basée sur la connaissance a priori du champ de vitesse et de pression. Il s'agit donc d'une méthode itérative qui suppose des déformations faibles.

7.3.1 Présentation de la méthode de calcul de la surface libre

En introduisant dans l'équation de Laplace l'expression des contraintes normales et des rayons de courbure nous avons :

$$\tau_{nn} - p + p_a + p_{ref} = -\sigma \left(\frac{h''}{(1 + h'^2)^{3/2}} + \frac{h'}{r(1 + h'^2)^{1/2}} \right) \quad (38)$$

dans laquelle p_{ref} est une pression de référence, $h(r) = D - z(r)$ est la déformation locale

de la surface, $h' = \frac{\partial h}{\partial r}$ et $h'' = \frac{\partial^2 h}{\partial r^2}$.

Nous associons à cette équation les contraintes et conditions aux limites suivantes :

- $-2\pi \int_0^L h(r) r dr = 0$ (conservation du volume¹)
- $h'(r=0) = 0$ (continuité de la surface sur l'axe de symétrie)
- $h(r=L) = 0$ (le bord du creuset est considéré comme un point fixe)

Le membre de gauche de l'équation (38) n'est connu ou calculable avec précision qu'au centre des volumes de contrôle de la pression, nous noterons par la suite $K_n(r) = [\tau_{nn} - p + p_a]_n$ la valeur au nœud n de cette expression.

L'équation (38) est intégrée, après transformation en un système d'équations différentielles du premier ordre, par une méthode de Runge-Kutta à l'ordre 4 avec pas adaptatif et contrôle de l'erreur :

$$\frac{\partial h}{\partial r} = t \quad \frac{\partial t}{\partial r} = -\left(\frac{\hat{K}(r) + p_{ref}}{\sigma} (1+t^2)^{3/2} + \frac{t(1+t^2)}{r} \right) \quad (39)$$

Dans ce nouveau système $\hat{K}(r)$ est une approximation continue de $K_n(r)$, par exemple par interpolation spline (cette approximation est nécessaire puisque les points d'intégration ne sont pas connus). La méthode de Runge-Kutta ne s'utilise qu'avec des conditions initiales, il faut donc transformer les conditions aux limites. Nous présentons brièvement la démarche adoptée.

Condition initiale pour $h(r=L)=0$

La condition $h'(r=0) = 0$ étant aussi une condition initiale, il n'y a pas de transformation à faire. Pour l'autre condition, nous utilisons une méthode de tir en posant :

$$h(r=0) = u$$

et en modifiant la valeur du paramètre inconnu u par une méthode de la tangente :

$$u_{i+1} = \frac{h_i u_{i-1} - h_{i-1} u_i}{h_i - h_{i-1}} \quad (40)$$

Dans cette expression i représente l'itération courante de la méthode de tir, u_i la valeur du paramètre pour cette itération et $h_i = h(r=L)$ le résultat obtenu après intégration du système (39) avec comme condition initiale $u = u_i$. En pratique, il faut se donner les deux premières valeurs du paramètre. Nous avons utilisé les conditions $u_0 = 0, u_1 = -h_0$ avec succès puis-

¹ Le signe '-' provient de la définition de h

que nous obtenons en général $h(r = L) < 10^{-10}$ en deux ou trois essais.

Conservation du volume

La conservation du volume se fait par le choix de la pression de référence. Nous déterminons cette pression par la méthode de la tangente similaire à la précédente, la relation de récurrence s'appliquant maintenant sur la pression et la conservation du volume :

$$p_{j+1}^{ref} = \frac{\delta v_j p_{j-1}^{ref} - \delta v_{j-1} p_j^{ref}}{\delta v_j - \delta v_{j-1}} \quad (41)$$

Ce calcul est itérativement appliqué jusqu'à ce que l'erreur sur le volume soit la plus petite possible, nous obtenons en général $\delta v < 10^{-12}$ en utilisant la formule d'intégration suivante sur

$$\text{les } N \text{ points d'intégrations : } \delta v = -2\pi \int_0^L h(r) r dr \cong -2\pi \sum_{n=1}^{N-1} \int_{r_n}^{r_{n+1}} h_n(r) r dr$$

$$\text{En posant } h_n(r) = a_n r + b_n \quad a_n = \frac{h_{n+1} - h_n}{r_{n+1} - r_n} \quad b_n = h_n - a_n r_n \quad r_n \leq r \leq r_{n+1}$$

$$\text{on obtient : } \delta v = -2\pi \sum_{n=1}^{N-1} \left[\frac{a_n}{3} (r_{n+1}^3 - r_n^3) + \frac{b_n}{6} (r_{n+1}^2 - r_n^2) \right]$$

Pour démarrer la méthode, nous posons successivement $p_{ref} = -K_n(r)$ pour tous les points du maillage (sur lesquels K est connu) et nous choisissons pour $p_{j=0}^{ref}$ la valeur qui conduit au plus faible δv (en valeur absolue). Cette méthode est très efficace car nous recherchons une perturbation de la surface et il est probable qu'il existe déjà un point en équilibre mécanique pour lequel $K_n(r) + p_{ref} \cong 0$. Nous posons ensuite $p_{j=1}^{ref} = (1 + 10^{-3}) p_{j=0}^{ref}$, ce qui nous permet en général d'atteindre $\delta v < 10^{-15}$ en moins de 10 itérations.

7.3.2 Algorithme complet de calcul de la déformation

La séquence complète des opérations est résumée ci-dessous :

1. Calculer un champ de pression et de vitesse (par l'algorithme SCGS dans notre cas)
2. Calculer pour chaque volume de contrôle le long de la surface la suite $K_n(r)$
3. Résoudre le système (39) et trouver les conditions initiales et la pression de référence
 - 3.1. Pour déterminer $u = h(r = 0)$ tel que $h(r = L) < \varepsilon_h$, utiliser la relation (40)
 - 3.2. Pour chaque valeur de u , déterminer la pression de référence par (41) jusqu'à ce que $\delta v < \varepsilon_v$
 - 3.3. Retourner en 3.1 jusqu'à ce que toutes les conditions soient satisfaites

4. Avec la nouvelle surface libre $z(r) = D - h(r)$ remailler le domaine de calcul et calculer les nouveaux tenseurs métriques et les symboles de Christoffel.
5. Retourner en 1 si la convergence sur les variables principales de l'écoulement n'est pas atteinte

Nous avons choisi $\varepsilon_h = 10^{-10}$, $\varepsilon_v = 10^{-12}$, mais ces valeurs doivent être ajustées pour chaque problème traité.

7.3.3 Analyse des simulations avec surface libre

Nous présentons un exemple de simulation pour $P = 50W$ et $a = 1cm$ avec surface libre déformable à la figure 26. Des profils similaires ont été obtenus avec les autres puissances, seule la déflexion totale est modifiée, celle-ci augmentant avec la puissance.

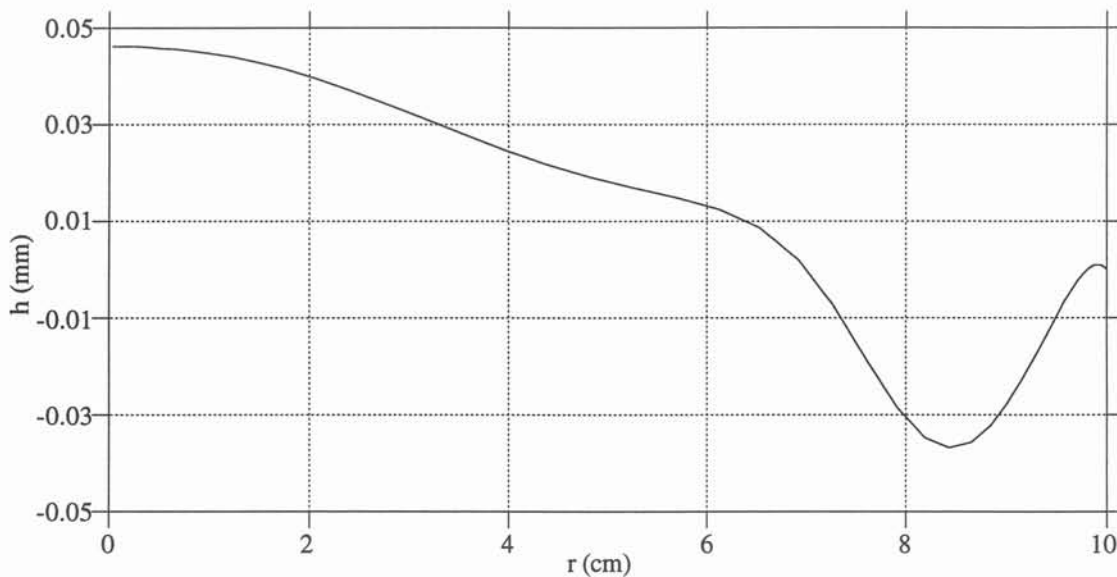


Figure 26. Déformation de la surface pour $P = 50W$ et $a = 1cm$. Le minimum de la déflexion est obtenu pour le minimum de la pression et correspond au cœur du vortex principal.

Nous constatons que la déformation est principalement due au minimum de pression créé par le vortex principal qui provoque, par conservation du volume, une élévation de la surface sur l'axe de symétrie. Ce comportement est confirmé par les résultats obtenus par D. Rivàs dans [Rivas 91a] et [Rivas 91b]. Notons que l'apparente contradiction avec les observations expérimentales, qui montrent presque toutes un creusement sous le faisceau, provient du fait que nous ne prenons pas en compte une éventuelle pression extérieure, telle que la vapeur saturante.

Nous pouvons donc vérifier *a posteriori* l'hypothèse d'une surface plane et rigide puisque les déformations obtenues ne modifient pas l'écoulement. Ceci n'est sans doute plus vrai dans les configurations où l'effet de recul de la vapeur devient le principal mécanisme de déformation.

8 Application à la refusion du Titane

Nous présentons dans ce chapitre un exemple de simulation sur du Titane en mettant l'accent sur le rôle de la turbulence et de la déformation de la surface. Les débits d'évaporation calculés sont comparés avec les résultats des expériences menées au CEA de Pierrelatte.

8.1 Paramètres de la simulation

Nous considérons un lingot de Titane de 10 cm de rayon et de profondeur, maintenu à sa température de fusion par les parois latérales et le fond. Le faisceau énergétique a une puissance efficace de 50 kW et nous faisons varier sa focalisation de 4 à 0.1 cm. Les nombres de Grashof et Reynolds thermocapillaire correspondants sont résumés dans le tableau 20.

Tableau 20. Nombre de Reynolds thermocapillaire et de Grashof pour la simulation Titane

a (cm)	4	3	2	1	0.5	0.3	0.2	0.1
$A^2 Re_\sigma$	$1.22 \cdot 10^8$	$1.64 \cdot 10^8$	$2.45 \cdot 10^8$	$4.91 \cdot 10^8$	$9.81 \cdot 10^8$	$1.64 \cdot 10^9$	$2.45 \cdot 10^9$	$4.91 \cdot 10^9$
Gr	$1.17 \cdot 10^9$	$6.55 \cdot 10^8$	$2.91 \cdot 10^8$	$7.28 \cdot 10^7$	$1.82 \cdot 10^7$	$6.55 \cdot 10^6$	$2.91 \cdot 10^6$	$7.28 \cdot 10^5$

Clairement, ces chiffres indiquent que les calculs devront être effectués avec un modèle turbulent en tenant compte de la convection naturelle et que le creusement dû au recul de la vapeur risque d'être important.

8.2 Caractéristiques de la turbulence interfaciale

Les configurations d'écoulement obtenues sont similaires à celle présentée figure 27 pour $a = 3$ cm et partagent les caractéristiques suivantes :

- La turbulence, par le biais de la viscosité turbulente, fait diffuser le vortex principal qui occupe toute la cavité
- Un important creusement est observé sous le faisceau
- Le faisceau est générateur de turbulence, au même titre que la paroi latérale

Précisons le troisième point à l'aide des profils de la figure 28.

Le terme de production de la turbulence par cisaillement, P_k , présente non seulement un maximum sur la paroi latérale (ce qui est conforme au modèle de loi de paroi utilisé), mais aussi à une distance proche du rayon caractéristique du faisceau.

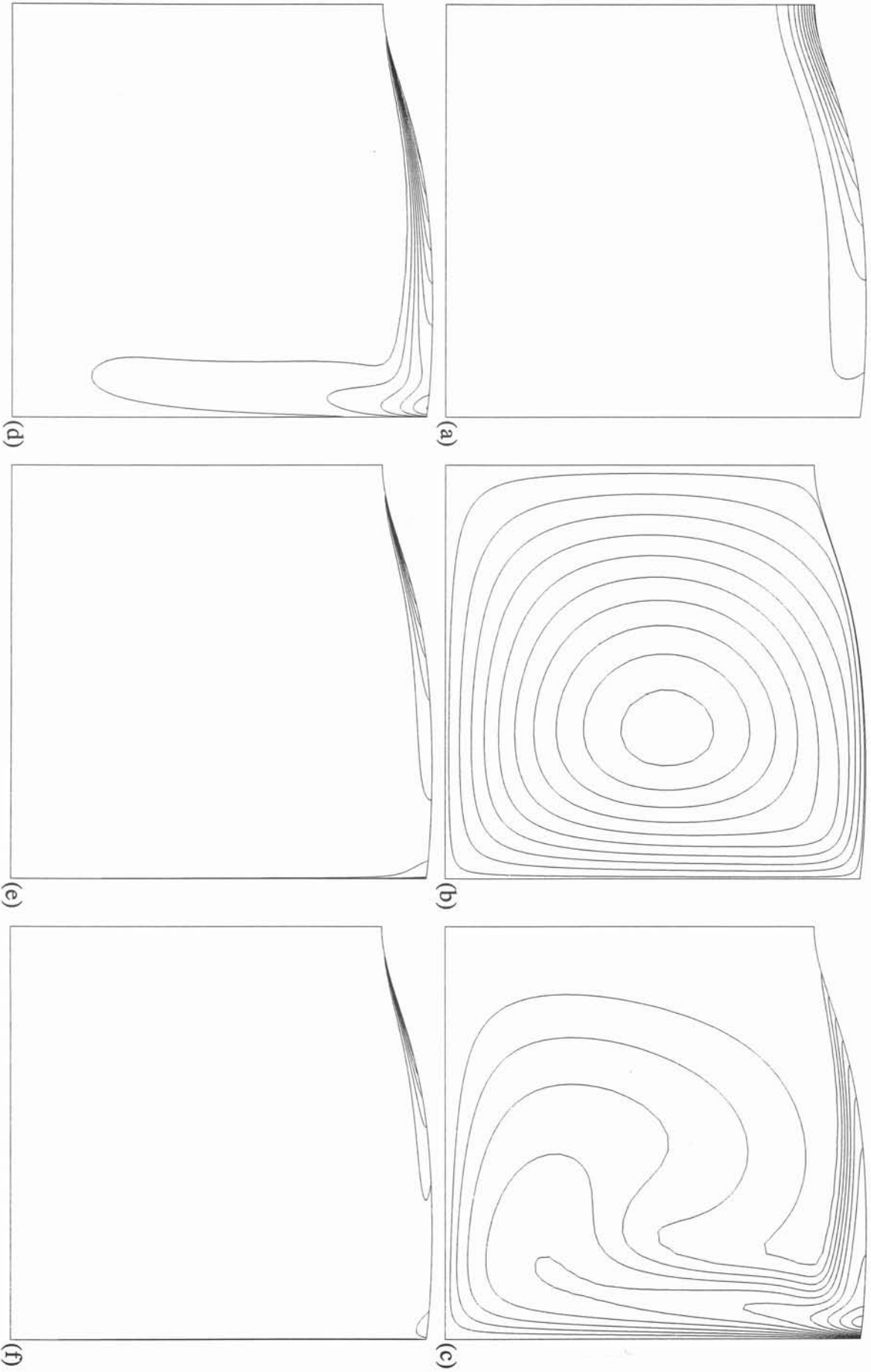
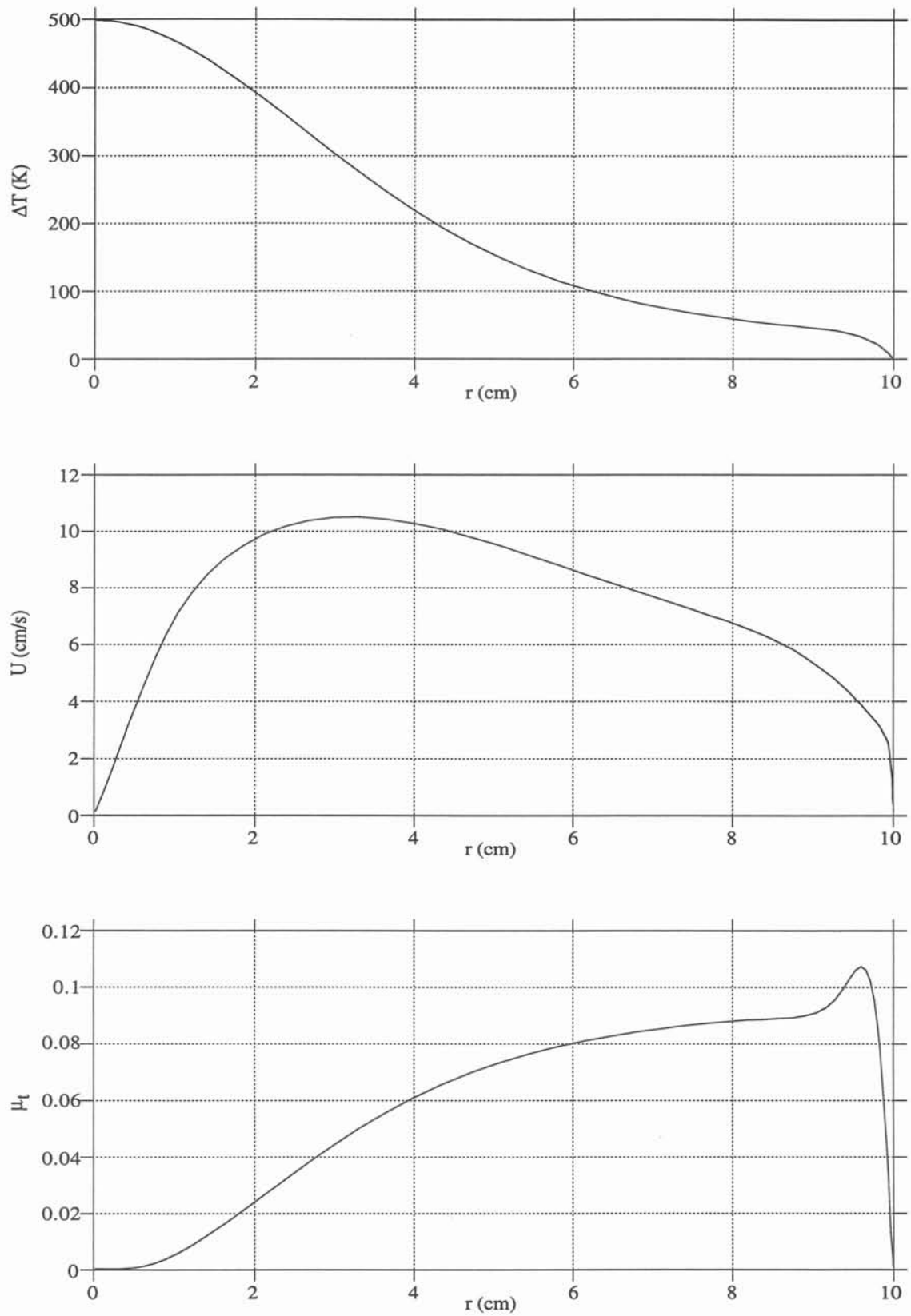


Figure 27. Isovaleurs pour T (a), ψ (b), μ_t (c), k (d), ϵ (e) et P_k (f). L'axe de symétrie du creuset se trouve à gauche.

**Figure 28.** Profils de long de la surface des grandeurs principales

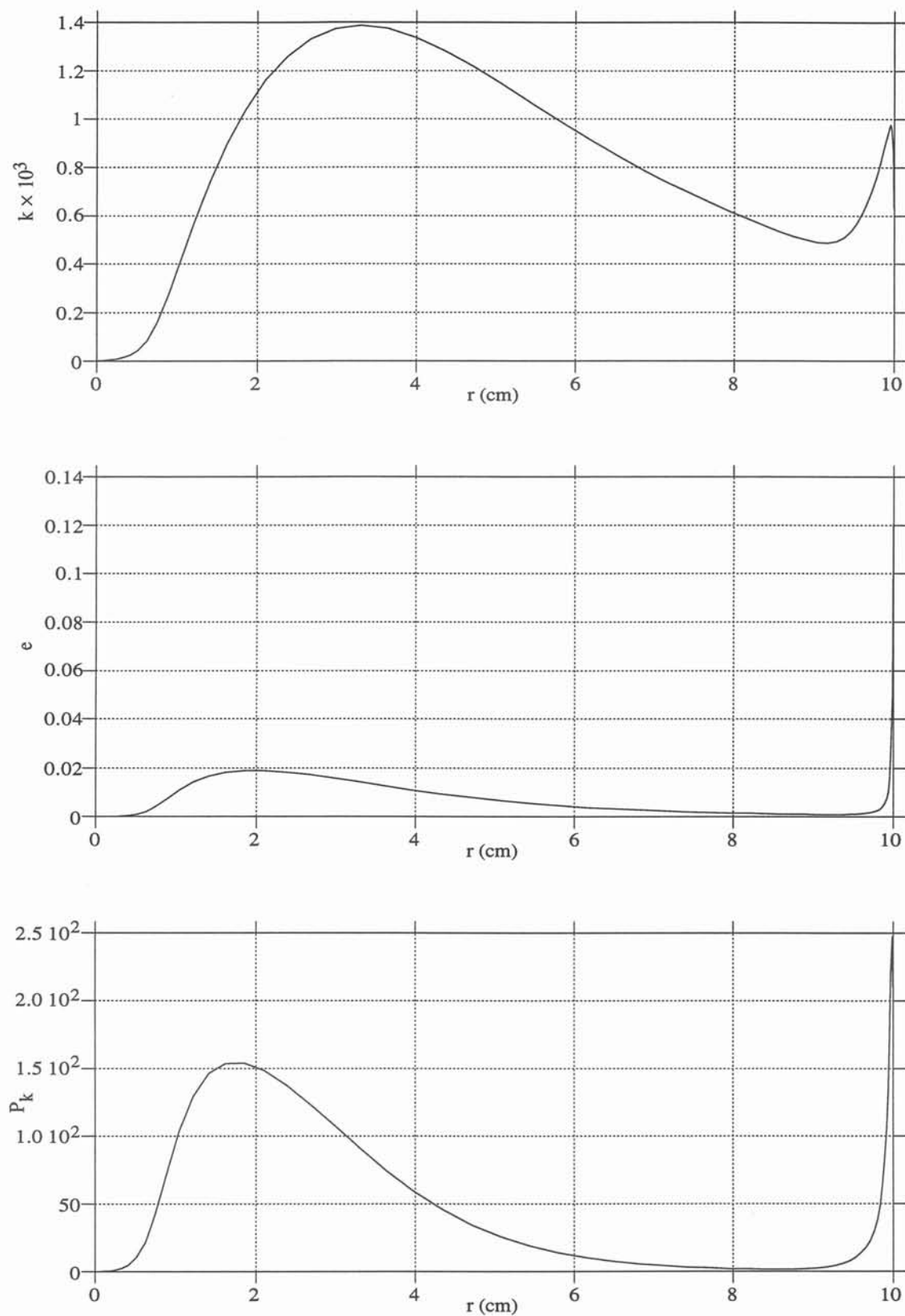


Figure 28. Profils de long de la surface des grandeurs principales (Suite)

Ceci traduit le fait que l'effet thermocapillaire, générateur de contrainte, a une influence non négligeable sur la turbulence par le biais des termes de production et explique le maximum observé pour l'énergie cinétique de la turbulence en $r = a$. Nous rapellons que le moteur de l'effet thermocapillaire est le gradient de température : celui-ci étant très faible sous le faisceau, les autres variables le sont aussi. Remarquons enfin l'effet du rayonnement et de l'évaporation sur l'aplatissement du profil de température sous le faisceau qui conduit à un maximum moins marqué pour la vitesse. Ces profils permettent aussi de rendre compte de l'adéquation du maillage adopté puisque tous les forts gradients sur la paroi latérale sont correctement représentés.

8.3 Evolution du débit d'évaporation en fonction de la focalisation

Pour chacune des simulations nous avons relevé le débit global d'évaporation calculé à partir

de la loi de Langmuir : $D = 2\pi \int_0^R \sqrt{\frac{M}{2\pi RT}} P_{sat}(T) r dr$, avec M la masse molaire du Titane et

T la température de surface. Ces valeurs sont reportées sur la courbe de la figure 29 en fonction du rayon caractéristique du faisceau.

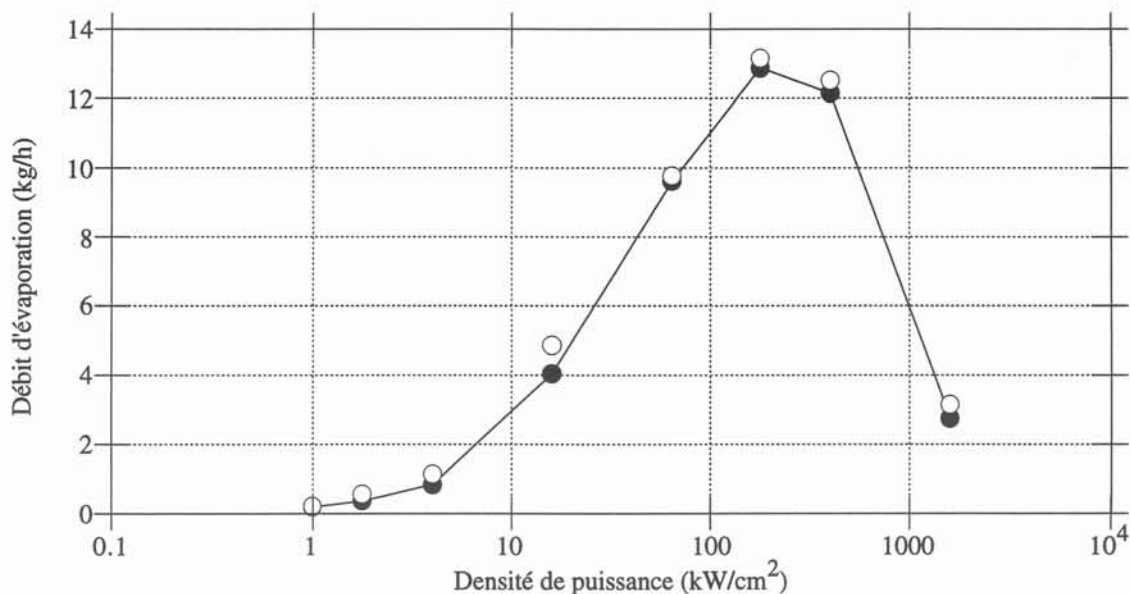


Figure 29. Débit d'évaporation en fonction de la densité de puissance. Les valeurs obtenus pour une densité de puissance supérieure à 10 kW/cm² sont largement surestimées par rapport aux données expérimentales, le désaccord semble provenir de l'insuffisance de la déformation et du modèle d'évaporation en surface. Les points en blanc ont été obtenus sans déformation de l'interface.

L'allure générale de cette courbe rappelle celle obtenue par Antoni *et al* et présentée dans [Antoni 93]. Cette courbe en "S" traduit le fait que la température maximale en surface ne peut dépasser une valeur limite en raison de l'importance croissante des pertes par évaporation et rayonnement, ce qui conduit à une saturation pour le débit de vapeur. La chute de celui-ci au-

delà d’une focalisation limite (environ 3 mm dans notre cas) est attribuée par les expérimentateurs à une dégradation de la qualité du faisceau et peut-être à un phénomène de masquage par la vapeur au-dessus du point chaud. Dans notre cas, il s’agirait plutôt d’un artefact numérique principalement causé par une “dégradation” de la discrétisation du maillage pour les très fortes focalisations, comme le tableau et les figures suivantes le montrent.

Tableau 21. Grandeur maximales relevées pour différentes focalisations (P = 50 kW)

a (cm)	Q (kW/cm ²)	T (K)	U (cm/s)	k	Pray (%)	Pevap (%)
0.1	1591.5	3120	94.0	0.895	15.1	13.3
0.2	397.89	3260	60.0	0.300	15.4	58.7
0.3	176.84	3315	50.0	0.064	16.0	61.6
0.5	63.662	3313	41.0	0.036	17.1	45.4
1	15.915	3000	29.0	0.011	18.0	24.0
2	3.9789	2615	17.5	4.88 10 ⁻³	19.6	3.8
3	1.7684	2440	10.5	1.4 10 ⁻³	18.7	2.0
4	0.9947	2360	5.50	5.2 10 ⁻⁴	18.7	1.1

La figure 30 permet de supposer que la vaporisation, en absorbant la majeure partie de l’énergie fournie, limite la température maximale en surface.

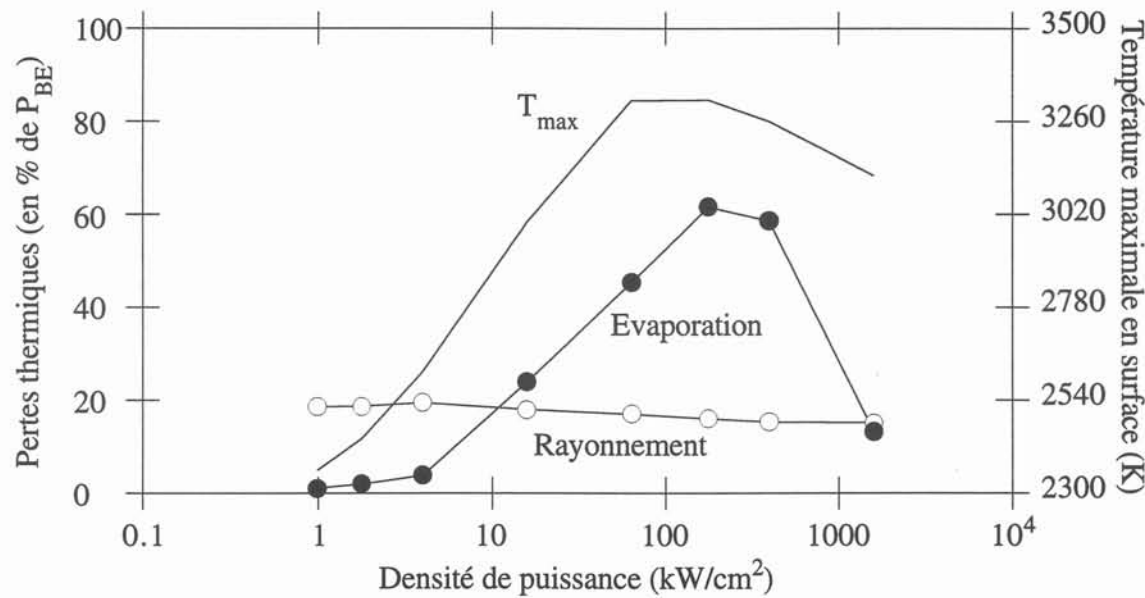


Figure 30. Pertes par évaporation et rayonnement en fonction de la densité de puissance : l’évaporation est le phénomène dominant dès que la focalisation augmente.

Pour les fortes densités de puissance les calculs sont en désaccord avec les expériences, les

pertes par évaporation étant au maximum de l'ordre de 10%. Nous discuterons ce point au paragraphe 8.4 traitant des limitations du modèle de déformation de l'interface. En ce qui concerne la turbulence, la figure 31 permet de se rendre compte qu'elle augmente avec la focalisation, ce qui explique sans doute le changement de régime apparent dans l'évolution de la vitesse en surface : le nombre de Reynolds turbulent défini par $Re_t = \frac{U_{max} L}{\nu_t}$ augmente comme le montre les données du tableau 22.

Tableau 22. Nombre de Reynolds turbulent en surface en fonction de la focalisation

a (cm)	0.1	0.2	0.3	0.5	1	2	3	4
μ_t	0.144	0.110	0.099	0.134	0.132	0.130	0.127	0.124
Re_t	2683	2241	2069	1257	903	553	340	183

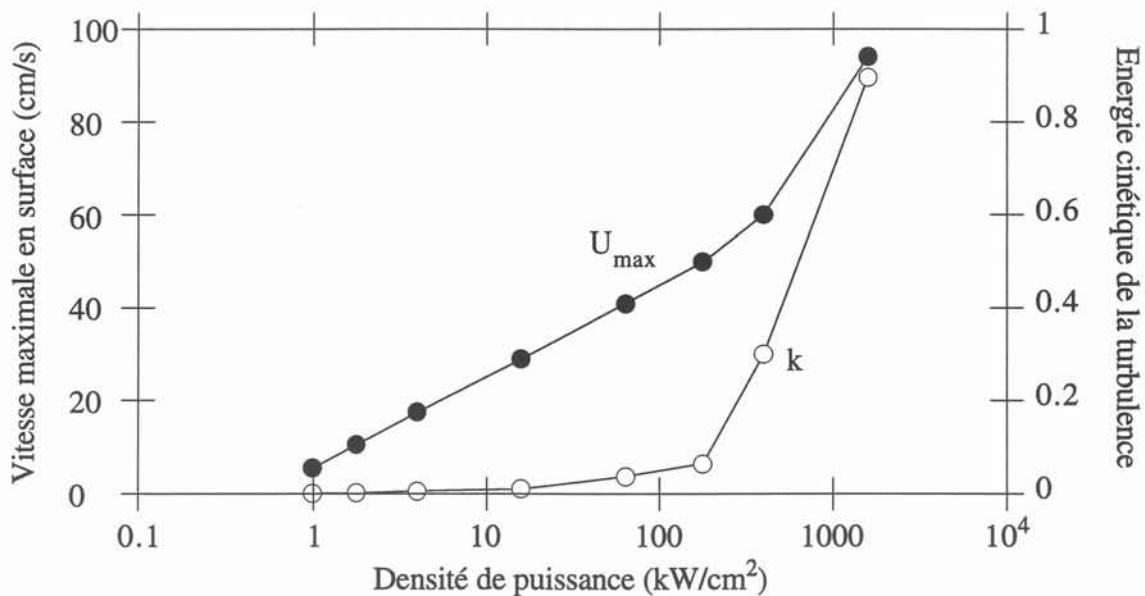


Figure 31. Evolution de la vitesse et de l'énergie de la turbulence maximale en surface. Le changement de régime apparent dans l'écoulement de surface peut être attribué à l'augmentation de la viscosité effective lorsque la turbulence se renforce et conduit à une diminution du nombre de Reynolds thermocapillaire turbulent.

Ces résultats nous semblent qualitativement en accord avec les différentes observations expérimentales, sauf en ce qui concerne les très fortes focalisations. Nous remarquons tout de même que la chute de la température de surface peut s'expliquer par l'augmentation brusque des transferts turbulents, le brassage en surface facilitant l'évacuation de la chaleur vers le cœur de l'écoulement.

8.4 Limites du modèle d'évaporation et de déformation de la surface

Le principal mécanisme de déformation de la surface est la contre-pression exercée par la vapeur sous le faisceau. Dans notre modèle de déformation nous avons introduit cet effet en posant $P_{ext} = \gamma P_{sat}(T)$ avec γ un coefficient de corrélation compris habituellement entre 0.5 et 1. Nous avons choisi $\gamma = 0.8$ car nous supposons une enceinte suffisamment grande devant le libre parcours moyen des molécules de vapeur, minimisant ainsi les effets de choc élastique dans la vapeur elle-même.

Malgré cela, la méthode de déformation utilisée s'est avérée inadaptée aux fortes focalisations (typiquement pour $Q > 10 \text{ kW/cm}^2$) puisqu'il n'a pas été possible de déformer la surface de façon satisfaisante. Plus précisément, nous n'avons obtenu qu'une déformation approchée mais nous avons tout de même effectué les calculs avec cette approximation afin d'observer un éventuel effet par rapport à des simulations sans déformation. Nous pensons, d'après les résultats de la figure 30, que la (très) forte surestimation des pertes par évaporation pour $Q > 10 \text{ kW/cm}^2$ provient de l'insuffisance de notre modèle de déformation.

Ceci nous conduit à penser que le principal mécanisme limitant le débit de vapeur est bien la déformation de la surface. Un effort supplémentaire doit être fait pour modéliser ce phénomène, par exemple à l'aide d'une méthode aux éléments finis ou un calcul analytique. Il semble aussi que le problème de la stabilité de l'interface se posera nécessairement pour les plus fortes focalisations.

Conclusion

Nous avons abordé le problème des écoulements thermocapillaires par le biais de modèles analytiques en comparant leurs prédictions avec un modèle numérique.

Dans un premier temps nous nous sommes intéressés aux caractéristiques de l'écoulement dans la zone d'impact du faisceau grâce au modèle de Chan et Sanochkin. Nous avons alors montré que ce modèle décrit correctement le champ de vitesse et de température en surface pourvu que l'hypothèse d'une couche limite développée soit vérifiée, ce qui implique une limite inférieure au paramètre Q . Le principal intérêt de ce modèle réside dans sa simplicité et il permet de calculer avec une bonne précision la température sous le faisceau et la vitesse maximale, atteinte à une distance égale au rayon caractéristique de faisceau. Ce modèle reste par contre limité aux écoulements non confinés et ne donne pas d'indication sur le comportement global.

Cet aspect a été étudié avec un autre modèle, basé sur un nombre de Reynolds thermocapillaire Re_{σ} , qui a permis de caractériser avec une bonne précision l'influence de la focalisation, de la convection naturelle et d'une éventuelle déformation de la surface. En particulier, les résultats suivants ont été obtenus avec des simulations sur du Mercure :

- Dès lors que la convection naturelle est présente, elle contrôle le champ de température dans l'ensemble de la cavité.
- Le champ de vitesse en surface est principalement contrôlé par l'effet thermocapillaire.
- L'écoulement de cœur est contrôlé par la convection naturelle pour les faibles valeurs de Re_{σ} , et résulte plus ou moins de la superposition des différents effets pour les fortes valeurs.
- Les effets de la déformation de la surface induits par l'effet thermocapillaire sont négligeables dans cette configuration.

L'extension du modèle précédent au calcul de la fusion d'un cylindre de titane (10 X 10 cm, faisceau de 50 kW) nécessite la prise en compte de la convection naturelle, des pertes par évaporation et rayonnement, de la turbulence et de la déformation de la surface (principalement due à la pression de vapeur saturante au point d'impact). L'analyse des résultats a montré que le faisceau électronique est générateur de turbulence (par cisaillement puisque l'effet thermocapillaire est une contrainte) et qu'un phénomène de saturation intervient aux fortes focalisations, l'évaporation et le rayonnement consommant pratiquement toute l'énergie fournie.

L'évolution des débits d'évaporation calculés en fonction de la densité de puissance s'accorde qualitativement avec celle issue de résultats expérimentaux pour les densités de puissance

allant jusqu'à 10 kW/cm^2 . Au-delà, les limitations de notre modèle de déformation conduit à une surestimation du débit de vapeur, indiquant par là qu'il s'agit du principal mécanisme limitant l'efficacité du procédé de fusion par bombardement électronique.

Nous résumons sur la figure 32 les différentes configurations d'écoulement et les modèles correspondant en fonction du nombre de Reynolds thermocapillaire qui est le paramètre pertinent pour caractériser un écoulement thermocapillaire.

Pour mener à bien l'ensemble des simulations nous avons utilisé un modèle numérique basé sur la méthode des volumes finis et le modèle $k-\epsilon$ pour la turbulence. Cette méthode a été étendue aux maillages curvilignes non orthogonaux et nous avons utilisé l'algorithme SCGS, plus performant que le classique SIMPLE, pour résoudre les équations de qdm.

Le logiciel réalisant ces calculs a été écrit en C++, un langage orienté objet qui a permis une grande simplification dans l'écriture des expressions tensorielles.

Nous terminerons en remarquant qu'il serait souhaitable de confirmer (ou d'infirmer...) les prédictions des simulations à l'aide d'une expérience bien instrumentée, par exemple sur du Mercure et d'utiliser une autre approche pour la déformation de l'interface.

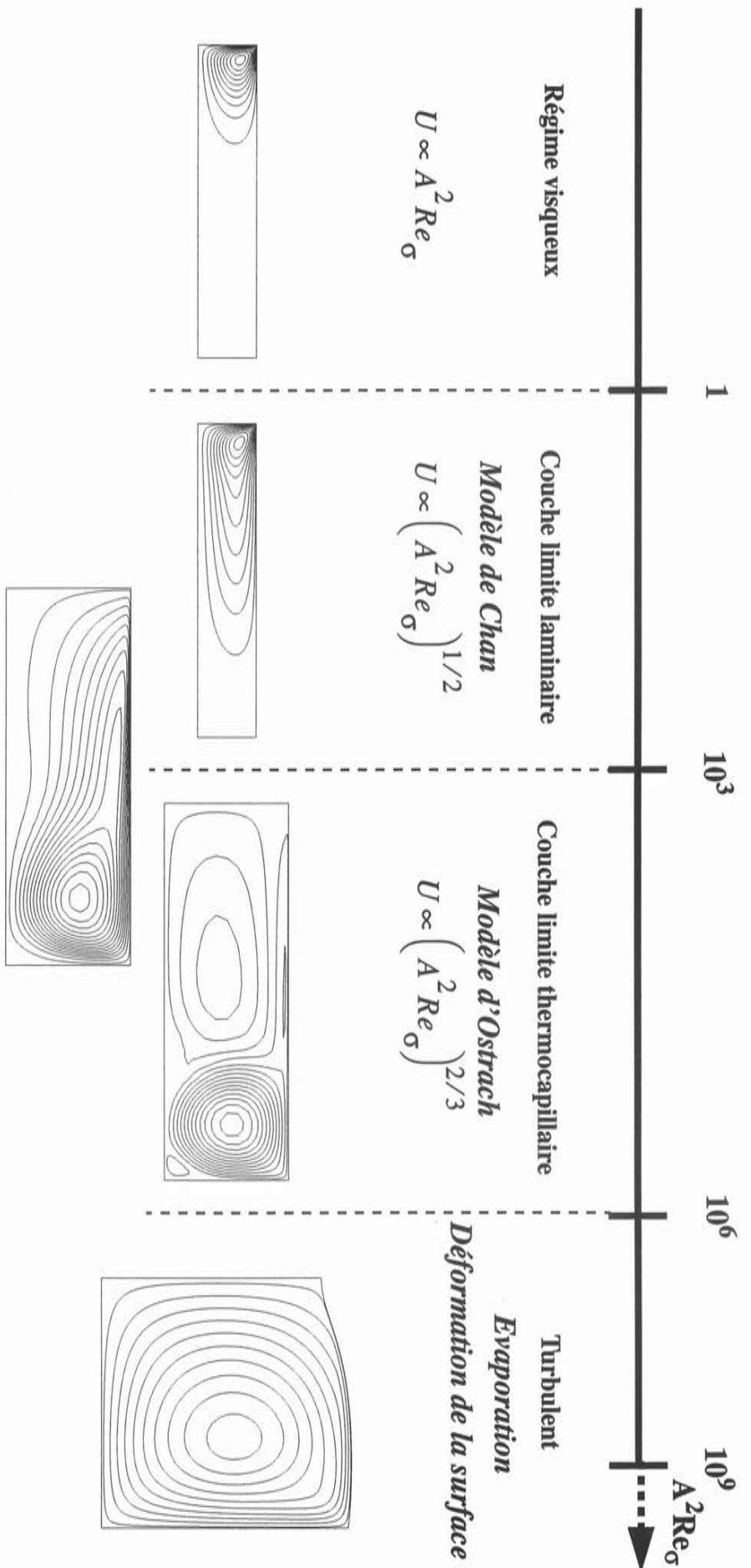


Figure 32. Configurations d'écoulement, transitions et modèles analytiques en fonction du nombre de Reynolds thermocapillaire

A Eléments de calcul tensoriel

A.1 Transformation de coordonnées

Définissons par (y^i) les coordonnées cartésiennes relatives à une base fixe \mathbf{i}_i et par (x^i) les coordonnées curvilignes générales dans une base arbitraires :

$$y^i = y^i(x^j) \quad (42)$$

Si le Jacobien de la transformation (42) défini par :

$$J = \det \left(\frac{\partial y^i}{\partial x^j} \right) = \begin{vmatrix} \frac{\partial y^1}{\partial x^1} & \frac{\partial y^1}{\partial x^2} & \frac{\partial y^1}{\partial x^3} \\ \frac{\partial y^2}{\partial x^1} & \frac{\partial y^2}{\partial x^2} & \frac{\partial y^2}{\partial x^3} \\ \frac{\partial y^3}{\partial x^1} & \frac{\partial y^3}{\partial x^2} & \frac{\partial y^3}{\partial x^3} \end{vmatrix} \quad (43)$$

est non nul, la transformation est dite non singulière, et il existe une transformation inverse telle que :

$$x^j = x^j(y^i)$$

On définit deux bases de vecteurs notées \mathbf{e}_i et \mathbf{e}^i appelées respectivement base naturelle et base duale par :

$$\mathbf{e}_i = \frac{\partial y^m}{\partial x^i} \mathbf{i}_m \quad \mathbf{e}^i = \frac{\partial x^i}{\partial y^m} \mathbf{i}^m$$

Ces deux bases possèdent des propriétés de réciprocity et d'orthogonalité que l'on peut résumer par :

$$\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}^j = \delta_i^j \quad \text{avec : } \delta_i^j = \begin{cases} 1 & \text{si } i=j \\ 0 & \text{si } i \neq j \end{cases}$$

Les vecteurs de ces bases sont suffisants pour représenter des vecteurs, mais pour les tenseurs d'ordre supérieur on doit introduire de nouvelles bases construites par produit tensoriel des vecteurs initiaux. Dans le cas des tenseurs d'ordre 2, on a par exemple les bases suivantes :

$$e_i \otimes e_j \quad e_i \otimes e^j \quad e^i \otimes e_j \quad e^i \otimes e^j \quad (44)$$

A.2 Composantes covariantes, contravariantes, mixtes

Un vecteur \mathbf{a} a des composantes uniques liées à une base, en particulier relativement aux bases naturelles et duales :

$$\mathbf{a} = a^i e_i = a_i e^i$$

Les champs scalaires a^i et a_i sont respectivement appelées les composantes contravariantes et covariantes du vecteur \mathbf{a} .

De façon analogue, dans le cas d'un tenseur \mathbf{A} du second ordre exprimé dans les bases définies par (44) :

$$\mathbf{A} = A^{ij} (e_i \otimes e_j) = A_{ij} (e^i \otimes e^j) = A_i^j (e^i \otimes e_j) = A_j^i (e_j \otimes e^i)$$

Les éléments A^{ij} , A_{ij} , A_i^j , A_j^i sont respectivement appelés les composantes tensorielles contravariantes, covariantes et mixtes du tenseur \mathbf{A} .

A.2.1 Métrique

La topologie dans R^3 est définie par la métrique, forme quadratique définie positive associant un élément de longueur à tout déplacement (dx^i) :

$$ds^2 = g_{ij} dx^i dx^j$$

dans laquelle ds est la longueur de l'arc différentiel et g_{ij} les composantes covariantes du tenseur métrique défini par :

$$g_{ij} = e_i \cdot e_j = \frac{\partial y^m}{\partial x^i} \cdot \frac{\partial y^m}{\partial x^j}$$

On définit de même les composantes contravariantes du tenseur métrique :

$$g^{ij} = e^i \cdot e^j = \frac{\partial x^i}{\partial y^m} \cdot \frac{\partial x^j}{\partial y^m}$$

La relation entre le Jacobien de la transformation (43) et le déterminant g des cofacteurs de g_{ij} est alors :

$$g = \det(g_{ij}) = J^2$$

Les composantes mixtes du tenseur métrique se déduisent de la définition des vecteurs de base :

$$g_i^j = e^i \cdot e_j = \delta_i^j$$

Les composantes de g^{ij} et g_{ij} sont symétriques par rapport aux indices i et j et peuvent être reliées aux normes des vecteurs de base par :

$$\|e_i\| = \sqrt{g_{ii}} \quad \|e^i\| = \sqrt{g^{ii}}$$

Finalement, les composantes du tenseur métrique, en permettant le passage entre les bases naturelles et duales permettent d'écrire :

$$a^i = g^{im} a_m \quad a_i = g_{im} a^m \quad A^{ij} = g^{im} A_m^j = g^{mj} A_m^i = g^{im} g^{jn} A_{mn}$$

La définition des différentes bases est résumée figure 33.

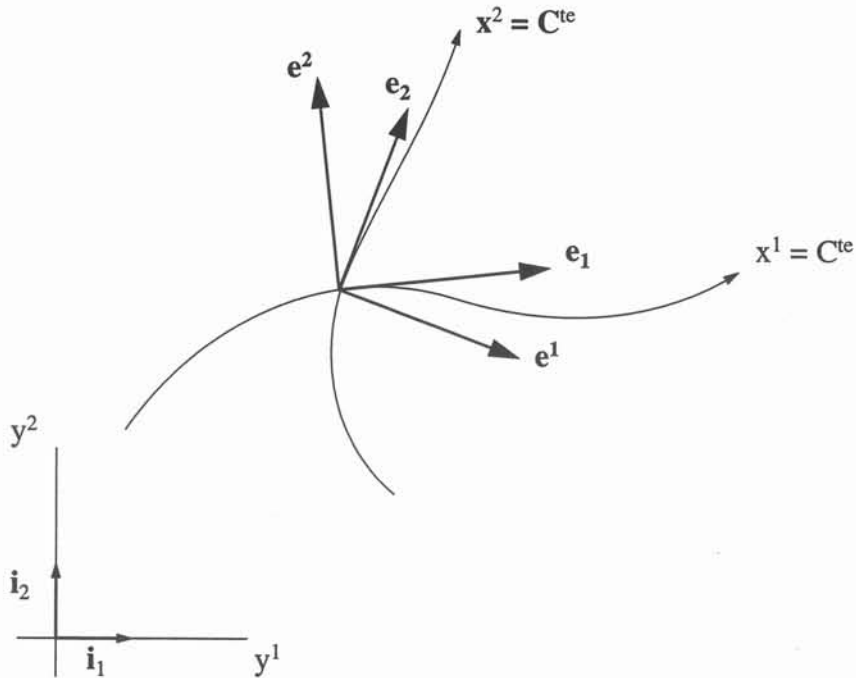


Figure 33. Coordonnées curvilignes générales : bases naturelles et duales

A.2.2 Symboles de Christoffel

La dérivation des vecteurs de base e peut être écrite sous la forme compacte suivante :

$$\frac{\partial e_i}{\partial x^j} = \Gamma_{ij}^m e_m \quad \frac{\partial e^i}{\partial x^j} = -\Gamma_{jm}^i e^m \quad (45)$$

Ces relations font intervenir les symboles de Christoffel¹ Γ_{jk}^i dont les composantes peuvent s'exprimer en fonction du tenseur métrique :

$$\Gamma_{jk}^i = \frac{1}{2} g^{im} \left(\frac{\partial g_{jm}}{\partial x^k} + \frac{\partial g_{km}}{\partial x^j} - \frac{\partial g_{jk}}{\partial x^m} \right)$$

A.2.3 Dérivées covariantes

Un champ de vecteur ne se dérive pas comme un champ de scalaire puisqu'il faut tenir compte des relations (45) :

$$\frac{\partial \mathbf{a}}{\partial x^j} = \frac{\partial}{\partial x^j} (a^i e_i) = \frac{\partial a^i}{\partial x^j} e_i + a^i \frac{\partial e_i}{\partial x^j} = (\nabla_j a^i) e_i \quad (46)$$

$(\nabla_j a^i) e_i$ est la dérivée covariante des composantes contravariantes du vecteur \mathbf{a} et s'exprime par :

$$\nabla_j a^i = \frac{\partial a^i}{\partial x^j} + a^m \Gamma_{mj}^i \quad (47)$$

On peut définir de façon analogue les dérivées covariantes des composantes covariantes :

$$\frac{\partial \mathbf{a}}{\partial x^j} = \frac{\partial}{\partial x^j} (a_i e^i) = \frac{\partial a_i}{\partial x^j} e^i + a_i \frac{\partial e^i}{\partial x^j} = (\nabla_j a_i) e^i \text{ avec } \nabla_j a_i = \frac{\partial a_i}{\partial x^j} - a_m \Gamma_{ij}^m \quad (48)$$

Pour un champ de tenseurs \mathbf{A} on a :

$$\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial x^k} = \frac{\partial}{\partial x^k} [A^{ij} (e_i \otimes e_j)] = (\nabla_k A^{ij}) (e_i \otimes e_j) \text{ avec } \nabla_k A^{ij} = \frac{\partial A^{ij}}{\partial x^k} + A^{mj} \Gamma_{mk}^i + A^{im} \Gamma_{mk}^j \quad (49)$$

A.3 Composantes physiques

En coordonnées générales les composantes contravariantes des tenseurs n'ont pas les mêmes dimensions que les variables physiques correspondantes. De plus les composantes contra- ou

¹ Ces symboles n'ont pas le caractère tensoriel et ne suivent donc pas les règles de linéarité, d'associativité et de non commutativité des espaces tensoriels.

covariantes d'un même tenseur ne sont souvent pas les mêmes. Pour éviter tout risque d'erreur dans d'interprétation physique de ces coordonnées, RICCI et LEVI-CIVITA ont proposé en 1901 de définir de nouvelles composantes pour les vecteurs :

$$\sqrt{g_{ii}} V^i \quad \sqrt{g^{ii}} V_i \quad \frac{V^i}{\sqrt{g^{ii}}} \quad \frac{V_i}{\sqrt{g_{ii}}}$$

Les vecteurs de la base naturelle associés à ces composantes sont définis par :

$$e_{(i)} = \frac{e_i}{\sqrt{g_{ii}}} = \frac{e_i}{\|e_i\|} \text{ (pas de sommation sur } i) \quad (50)$$

$$\text{et ceux de la base duale par : } e^{(i)} = \sqrt{g_{ii}} e^i \quad (51)$$

Notons que :

- Les vecteurs $e_{(i)}$ sont adimensionnels et unitaires, colinéaires aux vecteurs e_i .
- Les vecteurs $e^{(i)}$ sont adimensionnels mais non unitaires, colinéaires aux vecteurs normaux e^i .

Les composantes des vecteurs et tenseurs exprimés dans ces nouvelles bases sont appelées composantes physiques, leurs définitions, compte tenu de (50) et (51), sont :

Pour les composantes physiques contravariantes :

$$a = a^{(i)} e_{(i)} \quad A = A^{(ij)} (e_{(i)} \otimes e_{(j)}) \quad a^{(i)} = \sqrt{g_{ii}} a^i \quad A^{(ij)} = \sqrt{g_{ii}} \sqrt{g_{jj}} A^{ij}$$

Pour les composantes physiques covariantes :

$$a = a_{(i)} e^{(i)} \quad A = A_{(ij)} (e^{(i)} \otimes e^{(j)}) \quad a_{(i)} = \frac{a_i}{\sqrt{g_{ii}}} \quad A_{(ij)} = \frac{A_{ij}}{\sqrt{g_{ii}} \sqrt{g_{jj}}}$$

A.3.1 Composantes physiques du tenseur métrique

De la définition des vecteurs de base physique on tire immédiatement :

$$\begin{aligned} g_{(ij)} &= e_{(i)} \cdot e_{(j)} = \frac{g_{ij}}{\sqrt{g_{ii}} \sqrt{g_{jj}}} & e_{(i)} &= g_{(im)} e^{(m)} \\ g^{(ij)} &= e^{(i)} \cdot e^{(j)} = \sqrt{g_{ii}} \sqrt{g_{jj}} g^{ij} & A^{(ij)} &= g^{(im)} A_{(m)}^{(j)} = g^{(im)} g^{(jn)} A_{(mn)} \\ g_{(i)}^{(j)} &= e_{(i)} \cdot e^{(j)} = \delta_i^j & ds^2 &= g_{(ij)} dx^{(i)} dx^{(j)} \end{aligned}$$

A.3.2 Symboles de Christoffel physiques

Les dérivées des vecteurs unitaires $\mathbf{e}_{(i)}$ peuvent s'écrire :

$$\frac{\partial \mathbf{e}_{(i)}}{\partial x^{(j)}} = \frac{1}{\sqrt{g_{jj}}} \frac{\partial}{\partial x^j} \left(\frac{\mathbf{e}_i}{\sqrt{g_{ii}}} \right) = \frac{1}{\sqrt{g_{ii}g_{jj}}} \Gamma_{ij}^m \mathbf{e}_m - \frac{1}{g_{ii}\sqrt{g_{ii}g_{jj}}} \Gamma_{ij}^n g_{in} \mathbf{e}_i$$

Exprimée dans la base physique, la relation devient :

$$\frac{\partial \mathbf{e}_{(i)}}{\partial x^{(j)}} = \frac{\sqrt{g_{mm}}}{\sqrt{g_{ii}g_{jj}}} \left(\Gamma_{ij}^m - g_i^m \frac{g_{in}}{g_{ii}} \Gamma_{ij}^n \right) \mathbf{e}_{(m)} = \Gamma_{(ij)}^{(m)} \mathbf{e}_{(m)}$$

définissant ainsi les symboles de Christoffel physiques par analogie avec la relation (45).

On peut de même écrire :

$$\frac{\partial \mathbf{e}^{(i)}}{\partial x^{(j)}} = -\Gamma_{(mj)}^{(i)} \mathbf{e}^{(m)}$$

Notons que contrairement aux symboles de Christoffel, les symboles de Christoffel physiques *ne sont pas symétriques* par rapport aux indices i et j .

A.3.3 Dérivées covariantes des composantes physiques

La définition des symboles de Christoffel physiques permet une analogie complète entre les expressions en termes de composantes physiques et les expressions (46) à (49) :

$$\frac{\partial a}{\partial x^{(j)}} = \frac{\partial}{\partial x^{(j)}} (a^{(i)} \mathbf{e}_{(i)}) = (\nabla_{(j)} a^{(i)}) \mathbf{e}_{(i)}$$

où $(\nabla_j a^i) \mathbf{e}_i$ est la dérivée covariante des composantes physiques contravariantes du vecteur \mathbf{a} et s'exprime par :

$$\nabla_{(j)} a^{(i)} = \frac{\partial a^{(i)}}{\partial x^{(j)}} + a^{(m)} \Gamma_{(mj)}^{(i)}$$

On peut définir de façon analogue les dérivées covariantes des composantes physiques covariantes :

$$\nabla_{(j)} a_{(i)} = \frac{\partial a_{(i)}}{\partial x^{(j)}} - a_{(m)} \Gamma_{(ij)}^{(m)} \quad \nabla_{(k)} A^{(ij)} = \frac{\partial A^{(ij)}}{\partial x^{(k)}} + A^{(mj)} \Gamma_{(mk)}^{(i)} + A^{(im)} \Gamma_{(mk)}^{(j)}$$

A.4 Opérateurs algébriques

Nous reportons ici l'expression des divers opérateurs utilisés :

Tableau 23. Expression des principaux opérateurs

Opéra- teur	Expression
$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}$	$g_{(ij)} a^{(i)} b^{(j)}$
$\mathbf{a} \otimes \mathbf{b}$	$(a^{(i)} b^{(j)}) (e_{(i)} \otimes e_{(j)})$
∇f	$g^{(jm)} \frac{\partial f}{\partial x^{(j)}} e_{(m)}$
$\nabla \mathbf{a}$	$g^{(jm)} (\nabla_{(j)} a^{(i)}) (e_{(m)} \otimes e_{(i)})$
$\nabla \mathbf{A}$	$g^{(km)} (\nabla_{(k)} A^{(ij)}) (e_{(m)} \otimes e_{(i)} \otimes e_{(j)})$
$\text{div } \mathbf{a}$	$\nabla_{(i)} a^{(i)}$
$\text{div } \mathbf{A}$	$(\nabla_{(j)} A^{(ij)}) e_{(i)}$

En introduisant l'opérateur différentiel :

$$\frac{\Delta}{\Delta x^{(j)}} (...) = \frac{\sqrt{g_{jj}}}{\sqrt{g}} \cdot \frac{\partial}{\partial x^{(j)}} \left(\frac{\sqrt{g}}{\sqrt{g_{jj}}} (...) \right)$$

On peut écrire :

$$\text{div } \mathbf{A} = \frac{\Delta}{\Delta x^{(j)}} [A^{(ij)} e_{(i)}] = \left(\frac{\Delta A^{(ij)}}{\Delta x^{(j)}} + A^{(mj)} \Gamma_{(mj)}^{(i)} \right) e_{(i)}$$

$$\text{div } \mathbf{a} = \frac{\Delta a^{(j)}}{\Delta x^{(j)}} = \frac{\Delta}{\Delta x^{(j)}} [g^{(jm)} a_{(m)}]$$

B Calcul des paramètres du modèle de Sanochkin

Dans [Sanochkin 89] l'auteur propose une méthode simple permettant de calculer les paramètres des équations (24) et (25) sous la forme suivante :

$$u_r = B(Pr) \nu r \left(\frac{2\sigma_T q_1}{k\mu\nu} \right)^{1/2} \quad T_m = A(Pr) \frac{q_0}{k} \left(\frac{k\mu\nu}{2\sigma_T q_1} \right)^{1/4}$$

dans lesquelles $A(Pr)$ et $B(Pr)$ sont des fonctions du nombre de Prandtl uniquement. C'est la méthode permettant de calculer ces fonctions que nous allons décrire.

B.1 Algorithme de calcul

Selon les notations de l'auteur, la température en surface est de la forme :

$$T_m = \vartheta(k, Pr) \cdot \frac{q_0}{\kappa} \left(\frac{\kappa\mu\nu}{2\sigma_T q_1} \right)^{1/4}$$

et le profil de vitesse :

$$u(x) = k^2 x \left(\frac{2\sigma_T q_1}{\kappa\mu\nu} \right)^{1/2}$$

Ces équations font intervenir deux fonctions $k(Pr)$ et $\vartheta(k, Pr)$. L'expression de ϑ ne présente pas de difficultés majeures :

$$\vartheta(Pr) = \frac{1}{k} e^{P - P \ln(P)} \gamma(P, P) \quad (\gamma(a, x) \text{ est la fonction gamma incomplète})$$

Par contre le calcul de k nécessite quelques étapes intermédiaires :

$$k^4 = \frac{\sum_{m \geq 0} d_m}{\sum_{m \geq 0} (Pr + m) d_m}$$

dans laquelle d_m est donné par :

$$d_0 = 1 \quad d_m = (-1)^m \cdot \frac{Pr^m}{m!} \cdot \frac{(Pr-2)(Pr-1)\dots(Pr+m-3)}{(Pr+1)(Pr+2)\dots(Pr+m)} \quad m \geq 1$$

Le programme suivant permet le calcul de k et ϑ pour tout nombre de Prandtl.

Le calcul de k est fait (sous une forme compacte se prêtant bien à la programmation) dans la fonction `calc_k`.

Toutes les libraires C ne comportant pas la fonction gamma ou gamma incomplète, nous avons programmé celles-ci sous une forme particulièrement bien adaptée à nos calculs, en nous inspirant des algorithmes décrits dans [Press 92].

B.2 Listing du programme “sanochkin.cxx”

```

6  /*****
7  *
8  * Avare Christophe le 05/08/93
9  *
10 * Calcul de la temperature sous le faisceau et de la vitesse en surface
11 * d'apres la methode decrite dans [Sanochkin 89]
12 *
13 * Ce programme ecrit pour Pr variant de 1e-4 a 20 les valeurs
14 *   mt      mu
15 * A Pr et B Pr calculees par les formules exactes et approchees
16 * (Pr < 1 et Pr > 1)
17 *
18 *****/
19
20 #include <iostream.h>
21 #include <math.h>
22
23 const int ITMAX=100;
24 const double EPS=1.0e-8;
25 const double e=1e-20;
26
27 //
28 // lnGamma : calcul du logarithme de la fonction gamma ([Press 92] p 214)
29 //
30
31 double lnGamma(double xx) {
32     static double cof[6]={76.18009172947146,-86.50532032941677,
33         +24.01409824083091,-1.231739572450155,+0.1208650973866179e-2,
34         -0.5395239384953e-5};
35     double x = xx,y = x,tmp = x+5.5,ser = 1.000000000190015;
36
37     tmp -= (x+0.5)*log(tmp);
38     for (int j=0; j<=5; j++) ser += cof[j]/++y;
39     return -tmp+log(2.5066282746310005*ser/x);
40 }
41
42 //
43 // iGamma : calcul de la fonction 'gamma incomplete' pour [Sanochkin 89] par
44 // les algorithmes de [Press 92] pp. 214-218
45 //
46
47 double iGamma(double a,double x) {
48     double sum,del,ap = a;
49     double lng = lnGamma(a);
50
51     // Dans le modele de Sanochkin on utilise seulement iGamma(Pr,Pr),
52     // nous sommes donc toujours dans le cas ou x < a+1 et la convergence est
53     // plus rapide en utilisant le developpement en series (programme gser dans
54     // [Press 92] p 218)
55
56     sum = del = 1.0/a;
57     for (int n=1; n<ITMAX; n++) {
58         ++ap;

```

```

59         del *= x/ap;
60         sum += del;
61         if (fabs(del) < fabs(sum)*EPS) break;
62     }
63
64     // Calcul de P(a,x)
65
66     double P = sum * exp(-x+a*log(x)-lng);
67
68     // puis de iGamma = P(a,x)*Gamma(x)
69
70     return P*exp(lng);
71 }
72
73 //
74 // calc_k : calcul du parametre k de [Sanochkin 89]
75 //
76
77 double calc_k(double P) {
78     double S=1.0,D=P,k=0.0,f=1.0,p=P;
79     int s=-1;
80
81     for (int m=1; m<ITMAX; m++) {
82         double a = 1.0;
83         double b = 1.0;
84         for (int i=-2; i<=m-3; i++) a *= P+i;
85         for (int j=1; j<=m; j++) b *= P+j;
86         double dm = s*(p*a);
87         dm /= (f*b);
88         if (fabs(dm)<e) break;
89         S += dm;
90         D += (P+m)*dm;
91         p *= P;
92         f *= m+1;
93         s *= -1;
94     }
95     k = sqrt(S/D);
96     k = sqrt(k);
97     return k;
98 }
99
100 //
101 // main : programme principal
102 // Ecriture en sortie des differents parametres pour chaque valeur de Pr
103 // Note : la valeur maximale pour Pr est environ 20, au-dela les erreurs
104 // d'arrondis dans calc_k donnent des valeurs aberrantes pour k
105 //
106 void main() {
107     double Pr=1e-3;
108
109     cout.setf(ios::scientific);
110     cout.precision(6);
111     cout << "Pr\tUr\tUr (Pr<<1)\tUr (Pr>>1)\tTm\tTm (Pr<<1)\tTm (Pr>>1)"
112     << endl;
113     while (Pr<=20.0) {
114         double k=calc_k(Pr);
115         // 2
116         // Ur = k (Eq. (1.2) p 114)
117         double Ur=k*k;
118         // 1 Pr-Pr log(Pr)
119         // Tm(x=0) = - e iGamma(Pr,Pr) (Eq. (1.13) p 115)
120         // k
121         double Tm=exp(Pr-Pr*log(Pr))*iGamma(Pr,Pr)/k;
122         // Ecriture de la valeur exacte de Ur et des valeurs limites
123         cout << Pr << '\t' << Ur
124         << '\t' << 1/sqrt(3.0*Pr)
125         << '\t' << 0.791*pow(Pr,-0.25)
126         // Ecriture de la valeur exacte de Tm et des valeurs limites
127         << '\t' << Tm
128         << '\t' << 1.316*pow(Pr,-3.0/4.0)
129         << '\t' << 1.410*pow(Pr,-3.0/8.0)
130         << endl;
131         Pr *= 1.2;
132     }
133 }

```


C Validation des méthodes numériques

C.1 Ecoulement de Couette plan

L'objet de ce test est de contrôler l'aptitude de l'algorithme SIMPLE à calculer correctement le champ de vitesse en présence d'un gradient de pression longitudinal imposé. La précision du résultat est directement liée à la qualité de la discrétisation des différents opérateurs :

- Les termes de convection doivent s'annuler le long des lignes de coordonnées.
- Les gradients de pressions croisés, dans le cas d'un maillage non orthogonal, ne doivent pas empêcher la convergence.
- Les conditions aux limites (de type Neumann pour la composante horizontale et à "symétrie sans flux" pour la composante tangentielle) à l'entrée et à la sortie du domaine de calcul doivent permettre de vérifier l'équation de continuité bien que la vitesse ne soit pas *a priori* connue.

C.1.1 Maillage orthogonal

Le domaine de calcul et les conditions aux limites sont représentés sur la figure suivante :

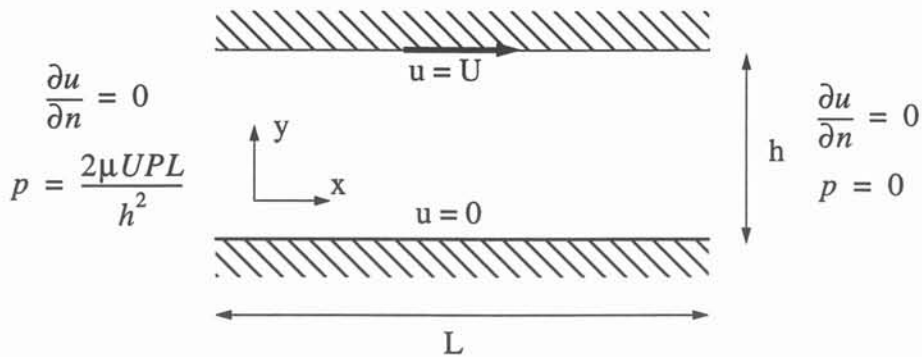


Figure 34. Caractéristiques géométriques et conditions aux limites pour l'étude de l'écoulement de Couette plan

La solution classique adimensionnelle des équations de Navier-Stokes pour ce problème est donnée par les relations suivantes :

$$\tilde{u} = \tilde{y} + P(1 - \tilde{y})\tilde{y} \quad \tilde{v} = 0 \quad \text{avec : } \tilde{u} = \frac{u}{U}, \tilde{y} = \frac{y}{h} \text{ et } P = \frac{h^2}{2\mu U} \left(-\frac{\partial p}{\partial x} \right)$$

Le gradient de pression adimensionnel P est le principal paramètre qui conditionne la nature de

l'écoulement : pour $P = 0$ on retrouve le profil linéaire d'un écoulement cisailé simple, et pour $P < 0$ il existe une zone du fluide dont l'écoulement s'inverse. Ces différentes caractéristiques sont reproduites figure 35 et permettent de comparer les résultats obtenus avec la solution analytique.

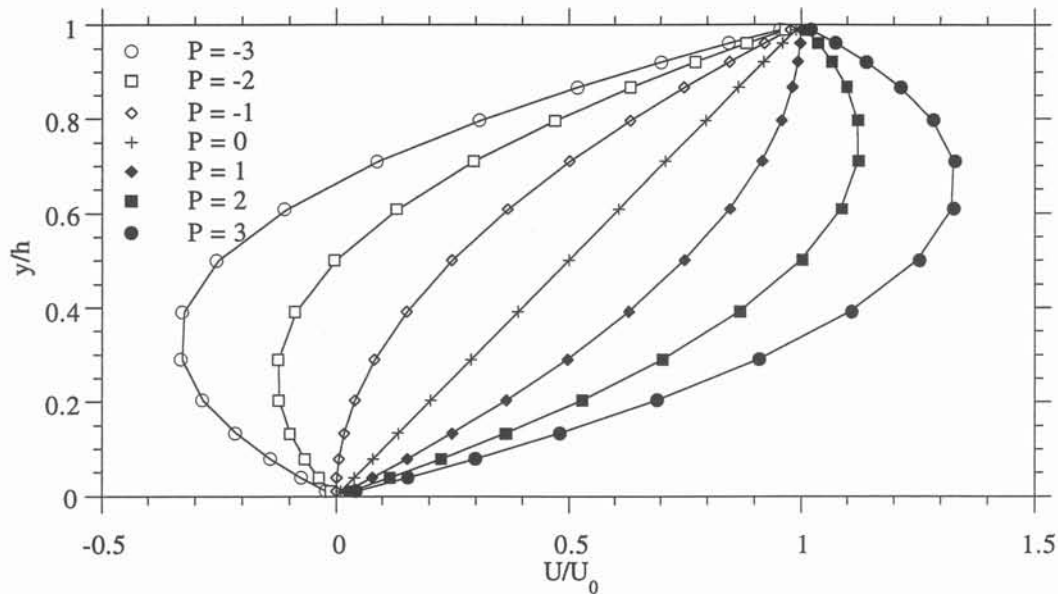


Figure 35. Comparaison entre les profils de vitesse $U(y)$ analytique (trait plein) et calculée (symboles) pour différentes valeurs du gradient de pression adimensionnel P .

C.1.2 Maillage non orthogonal

Les possibilités de résolution d'écoulements avec un maillage non orthogonal sont présentées ici en considérant une cavité comme celle de la figure 36. L'angle α formé par les lignes de coordonnées permettra de quantifier de la qualité de la solution en fonction de l'écart à l'orthogonalité.

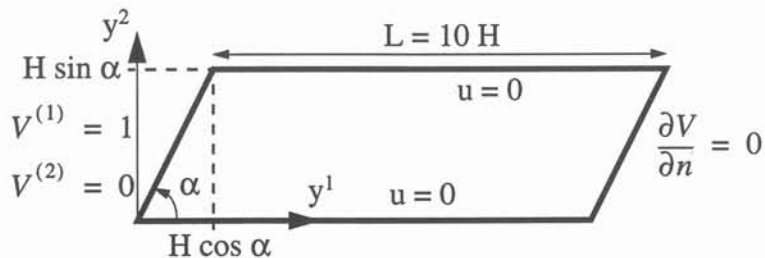


Figure 36. Géométrie utilisée et conditions aux limites.

Lorsque l'écoulement aval est établi, nous avons pour la composante horizontale de la vitesse le long d'une ligne de coordonnées verticale l'équation suivante :

$$V^{(1)} = 4U_{\max} \frac{y^2}{H \sin \alpha} \left(1 - \frac{y^2}{H \sin \alpha} \right)$$

En posant $U = V^{(1)} / U_{\max}$ et $y = y^2 / H \sin \alpha$ nous obtenons le profil parabolique adimensionnel : $U = 4y(1 - y)$

Nous présentons figure 37 les résultats obtenus pour $\alpha = 10$ et 45° avec un maillage 20×30 tel que celui présenté figure 38.

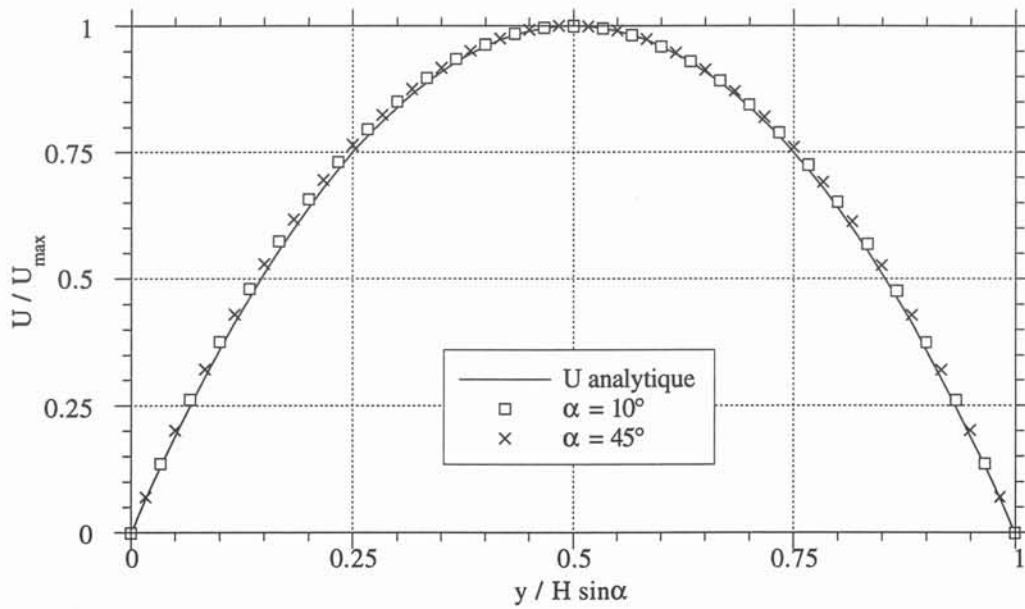


Figure 37. Comparaison entre les profils de vitesse analytique et numérique pour différentes valeurs de l'angle α .

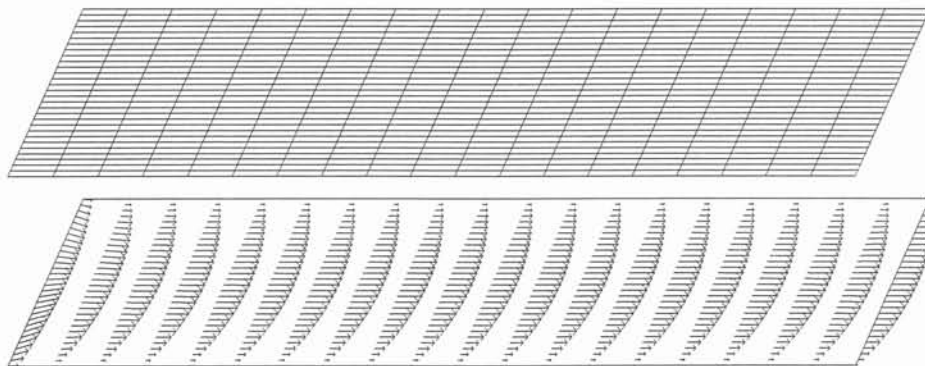


Figure 38. Un exemple de maillage (20×30) et de champ de vitesse obtenu pour $\alpha = 30^\circ$.

L'accord est excellent et montre que la discrétisation des différents opérateurs, des conditions aux limites et le calcul des quantités géométriques (tenseur métrique, symboles de Christoffel) permet de modéliser de façon satisfaisante des écoulements sur des maillages fortement déformés. Notons que le prix à payer est une plus forte sous-relaxation des équations, donc un allon-

gement du temps de calcul. A titre indicatif, le tableau 24 résume les différents paramètres utilisés pour la résolution comparés au cas orthogonal $\alpha = 90^\circ$.

Tableau 24. Paramètres de contrôle de l'algorithme SCGS utilisés pour différents angles α .

angle α	Facteurs de sous-relaxation *	Nombre d'itérations [†]	Temps de résolution [‡]
10	0.8, 0.8, 0.9	50	7.4
30	0.9, 0.9, 0.9	30	5.1
45	0.9, 0.9, 1.0	5	1.2
90	1.0, 1.0, 1.0	3	1

* Pour U, V et P
[†] Le résidu pour U et V est fixé à 10^{-5} et à 10^{-7} pour la pression
[‡] Rapporté au temps CPU pour $\alpha = 90^\circ$

C.2 Diffusion numérique des schémas de convection

Nous nous proposons de montrer dans ce test l'effet de la diffusion numérique dans le cas d'un écoulement purement convectif en présence d'une discontinuité. Pour cela on considère la cavité bidimensionnelle de la figure 39.

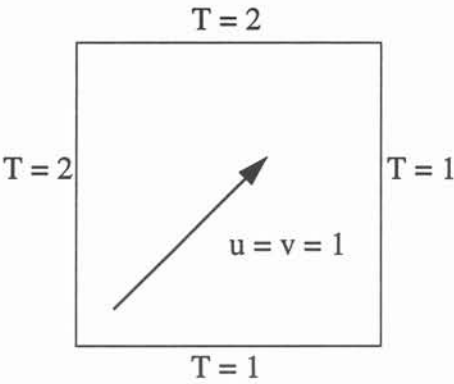


Figure 39. Conditions aux limites pour le test de diffusion numérique des schémas de convection.

Dans cet écoulement le champ de vitesse est donné et la température est imposée aux parois, les lignes de courant étant parallèles à 45° par rapport aux lignes du maillages afin de maximiser la diffusion numérique. L'équation pour la température se réduisant aux termes de convection, la solution exacte correspond au partitionnement du champ de température en une zone triangulaire supérieure à $T = 2$ et inférieure à $T = 1$. La figure 40 compare les profils de température le long de la ligne $y = 0.5$ obtenus avec les schémas Upwind et QUICK modifié selon [Hayase 92]. On constate que le schéma du second ordre permet de mieux représenter la discontinuité en $x = 0.5$, mais au prix d'un léger dépassement des valeurs extrêmes. Le caractère lissant des schémas du premier ordre est ici évident. Le comportement diffusif se comprend mieux à partir des isothermes de la figure 41.

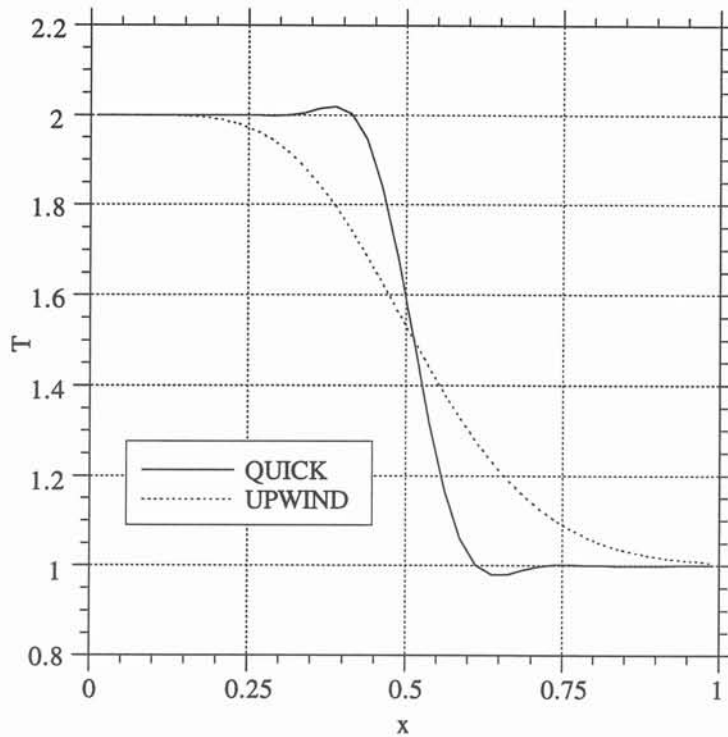


Figure 40. Comparaison entre les profils de température en $y = 0.5$ pour différents schémas.

Dans le cas du schéma Upwind elles s'écartent notablement des lignes de courant : tout se passe comme si un terme diffusif supplémentaire était introduit dans l'équation de la température. Pour le schéma Quick, ce phénomène reste limité et ne s'amplifie pas.

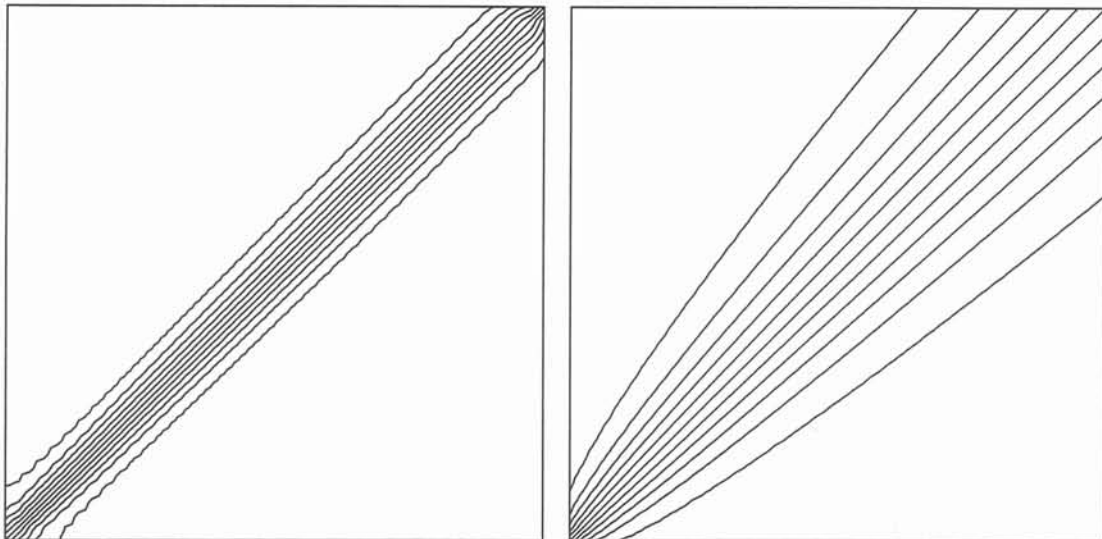


Figure 41. Isothermes pour QUICK (gauche) et Upwind (droite).

C.3 Convection naturelle à grand nombre de Rayleigh

Nous nous proposons de modéliser le problème classique de convection naturelle dans une boîte fermée avec les conditions aux limites de la figure 42.

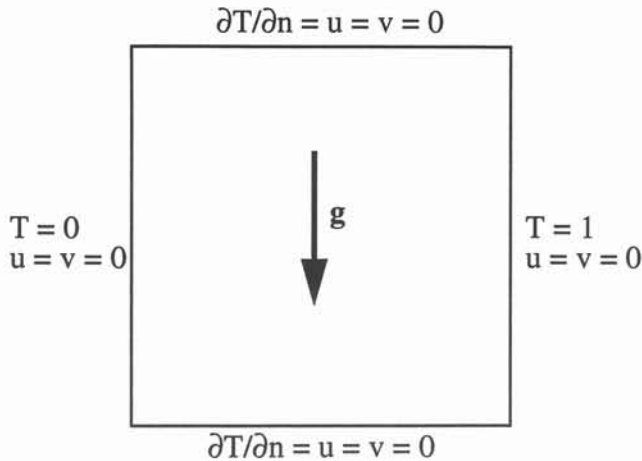


Figure 42. Schéma de la cavité et conditions aux limites : les calculs ont été faits avec $Ra = 10^5$ et $Pr = 0.17$.

Le but de ce test est de montrer l'efficacité de l'algorithme SCGS en présence de forces de volume et de quantifier l'influence des différents schémas de convection dans les couches limites thermique et cinématique. Les figures suivantes montrent que les écoulements obtenus sont conformes à ceux attendus et que l'influence des schémas de convection se fait essentiellement au niveau de la résolution de l'écoulement de cœur : le schéma QUICK permet une meilleure prédiction de la position des deux vortex et du palier horizontal de température (figures 43 et 44).

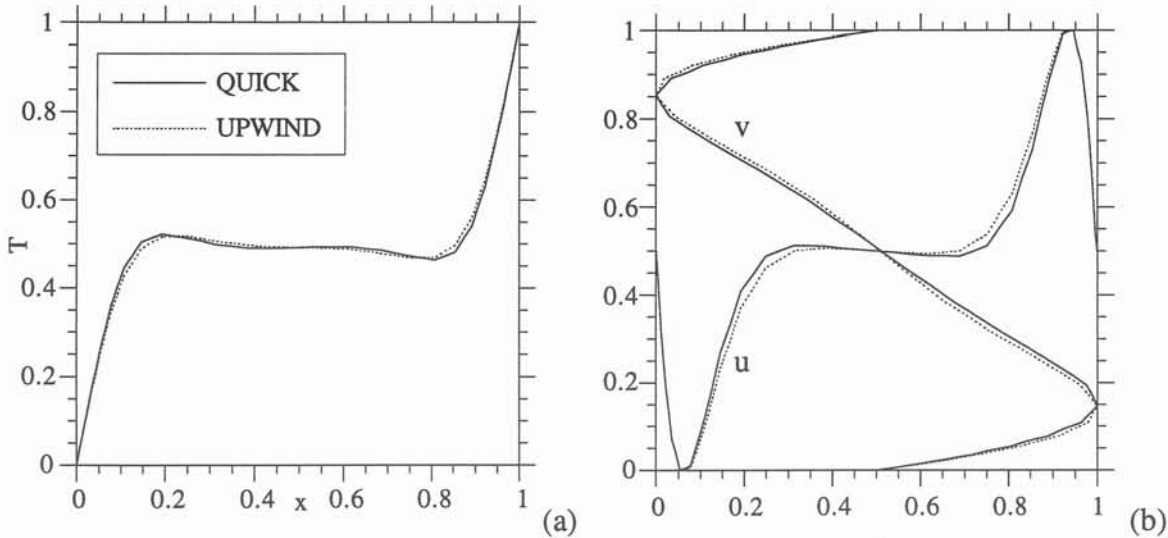


Figure 43. Convection thermogravitaire ($Ra = 10^5$ et $Pr = 0.17$).

(a) profils de température le long de la ligne $y = 0.5$ pour QUICK (trait continu) et Upwind (pointillé)
 (b) profils de la vitesse normalisée $U(x) = f(y=0.5)$ et $U(y) = f(x=0.5)$ pour QUICK (trait continu) et Upwind (pointillé)

D'une manière générale, les schémas du premier ordre ont tendance à sous-estimer les transferts de quantité de mouvement et de chaleur des couches limites vers le cœur, cet aspect prenant d'autant plus d'importance que la convection domine.

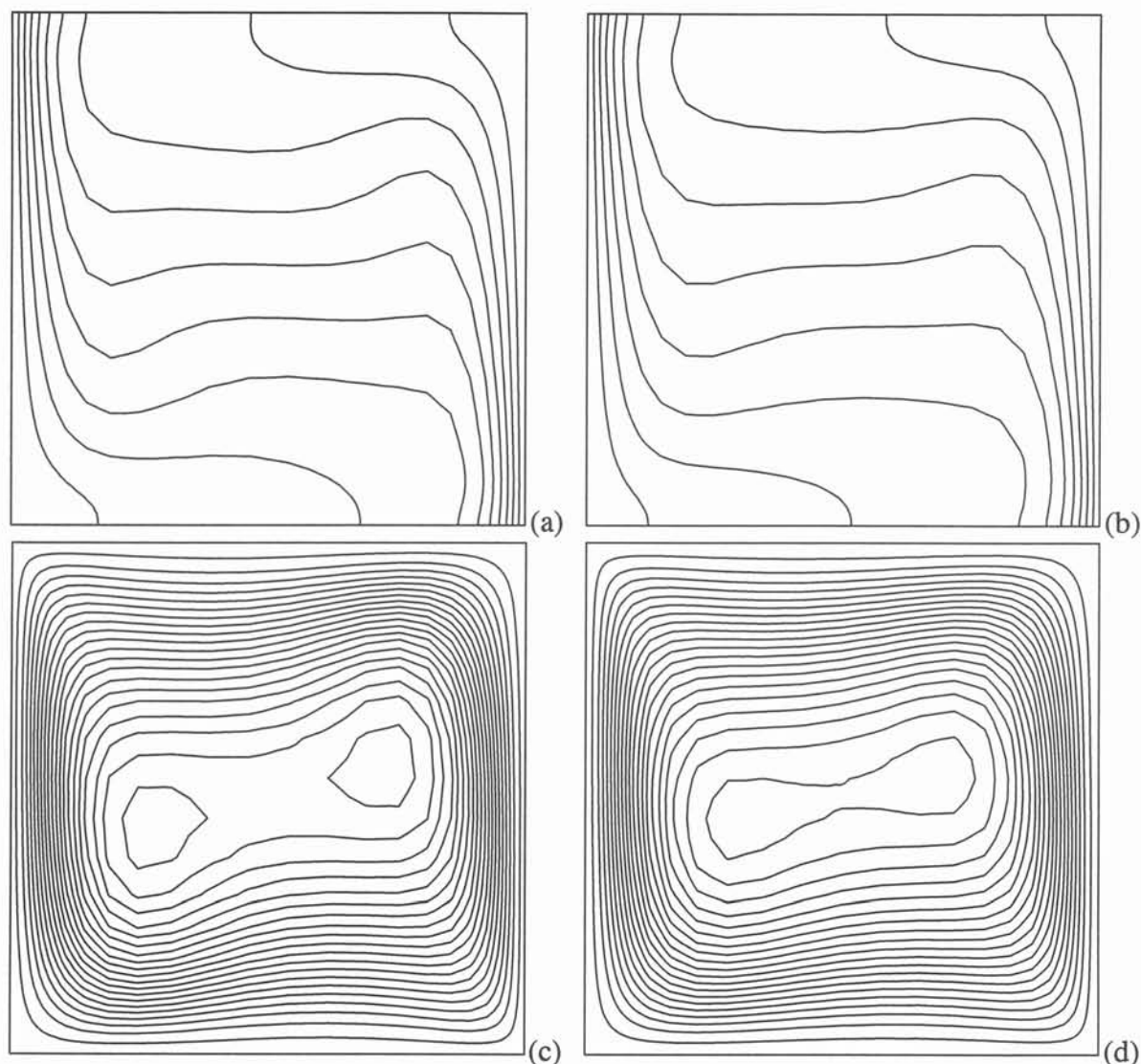


Figure 44. Convection thermogravitaire ($Ra = 10^5$ et $Pr = 0.17$). Isothermes pour QUICK (a) et Upwind (b), lignes de courant avec QUICK (c) et Upwind (d).

C.4 Convection dans une boîte fermée à paroi défilante

En complément au test précédent, une étude plus significative des problèmes liés aux écoulements à grand nombre de Reynolds est celle concernant la convection dans une boîte à paroi mobile telle que celle représentée figure 45. Ce test numérique a été largement abordé dans la littérature en raison des exigences imposées aux codes numériques en termes de robustesse jusqu'à des nombres de Reynolds de l'ordre de 10^4 et de sensibilité au maillage. D'autre part, l'analogie avec un écoulement capillaire nous permettra de mettre en évidence la supériorité de l'algorithme SCGS sur SIMPLE dans nos simulations. Nous présentons tout d'abord figure 46 l'évolution du résidu de masse dans le cas d'un maillage 20×20 et $Re = 1000$, le critère de convergence étant $R_{SIMPLE} < 5 \cdot 10^{-5}$ et $R_{SCGS} < 10^{-6}$. L'accélération due à SCGS est significative et s'explique par le fait que les coefficients de sous-relaxation optima sont plus élevés que pour SIMPLE, ainsi que le montre les données du tableau 25. Les figures suivantes illustrent les écoulements obtenus avec différentes combinaisons algorithme / schéma de convection. Dans

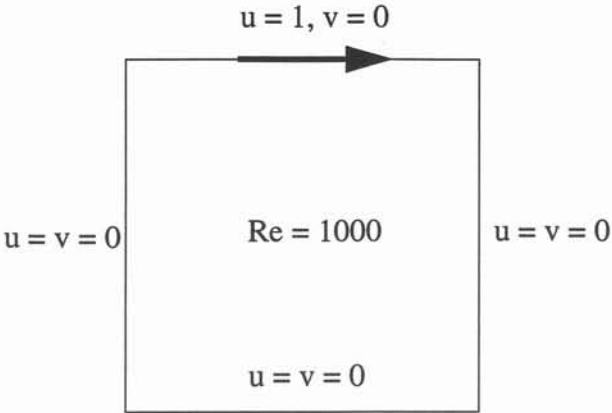


Figure 45. Schéma de la cavité à paroi défilante et conditions aux limites

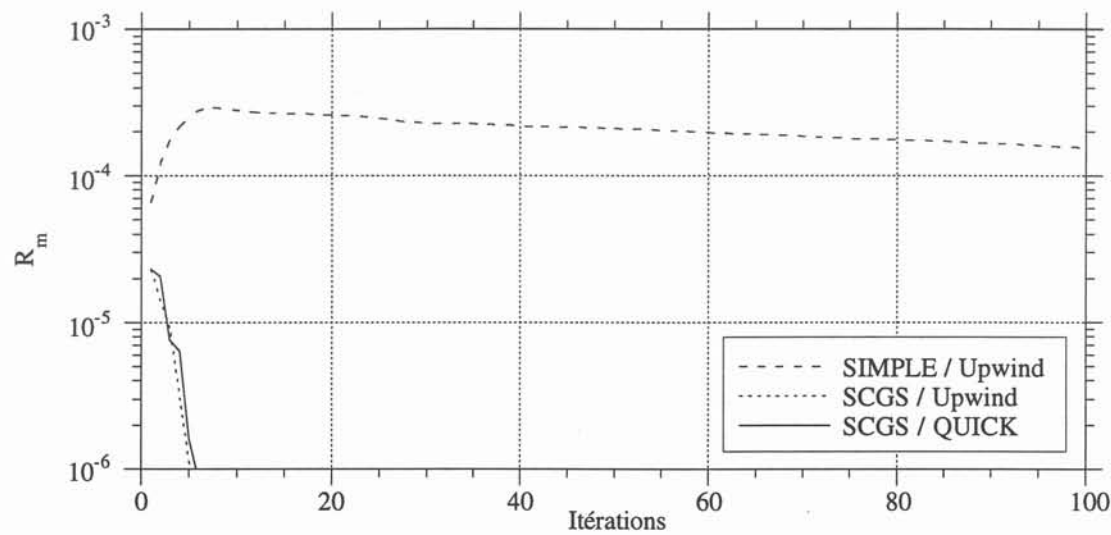


Figure 46. Evolution des résidus de masse dans le cas de SIMPLE et de SCGS.

le cas de SIMPLE, la position et l'intensité du vortex principal et les zones d'eau morte ne sont pas correctement prédites et il n'a pas été possible d'obtenir une solution convergée satisfaisante avec le schéma QUICK pour le maillage utilisé. Les données du tableau 26 montrent que le gain en précision apporté par la combinaison SCGS-QUICK est significatif puisque pour un maillage aussi grossier les résultats sont très proches de ceux obtenus par Vanka dans [Vanka 86] avec un maillage 321x321 et une méthode multi-grilles.

Tableau 25. Paramètres de calcul pour SCGS et SIMPLE.

	α_u, α_v	α_p	Sous-itérations*	N
SIMPLE	0.3	0.9	3 / 10	>1000
SCGS	0.9	1.0	10	6

* Pour SIMPLE le premier chiffre indique le nombre de sous-itérations de l'algorithme TDMA pour les équations de qdm et le second pour la correction de pression. Dans le cas SCGS le chiffre indique le nombre de balayages (alternés) des nœuds de pression.

Tableau 26. Synthèse des principaux résultats.

	Schéma	Ψ_{\max}	x	y
[Vanka 86] (321x321)	Hybride	0.1034	0.62	0.74
SCGS (20x20)	QUICK	0.0850	0.60	0.70
	Upwind	0.0506	0.70	0.75
SIMPLE (20x20)	QUICK	--	--	--
	Upwind	0.0510	0.70	0.72

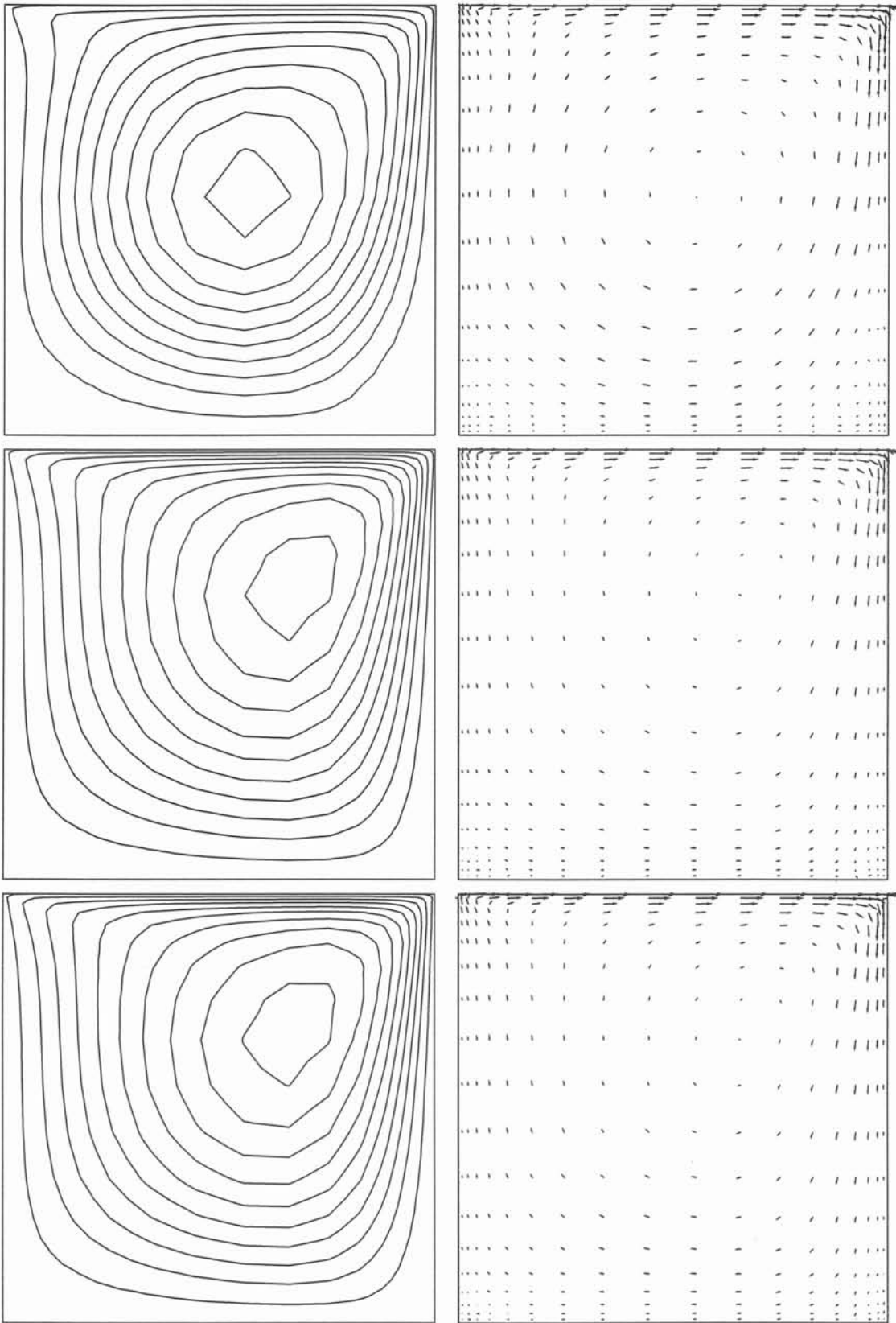


Figure 47. Fonction de courant et champ de vitesse pour SCGS + QUICK (haut), SCGS + Upwind (milieu), SIMPLE + Upwind (bas).

Propriétés physiques

Tableau 27. Propriétés du titane

Propriété	Symbole	Valeur	Unité
Masse volumique*	ρ	4110	kg/m ³
Viscosité dynamique*	μ	5.2 10 ⁻³	Pa s
Viscosité cinématique	ν	1.27 10 ⁻⁶	m ² /s
Conductivité thermique	κ	22.6	W/m K
Diffusivité thermique	α	6.91 10 ⁻⁶	m ² /s
Coefficient de dilatation thermique*	β	1.7 10 ⁻⁴	K ⁻¹
Température de fusion	T_f	1942	K
Capacité calorifique	C_p	795.2	J/kg K
Coefficient de variation de la tension superficielle	σ_T	-4.6 10 ⁻⁴	Nm/K
Tension superficielle*	σ	1.65	Nm ⁻¹
Coefficient de diffusion liquide/liquide [†]	D	0.38 10 ⁻⁸	m/s ²
Nombre de Prandtl	Pr	0.18	

* A la température de fusion

[†] Calculé numériquement par A. Pasturel du LTPCM de Grenoble

Tableau 28. Propriétés du mercure

Propriété	Symbole	Valeur	Unité
Masse volumique	ρ	13700	kg/m ³
Viscosité dynamique	μ	$1.7 \cdot 10^{-3}$	Pa s
Viscosité cinématique	ν	$1.24 \cdot 10^{-7}$	m ² /s
Conductivité thermique	κ	10	W/m K
Diffusivité thermique	α	$5.21 \cdot 10^{-6}$	m ² /s
Coefficient de dilatation thermique	β	$1.74 \cdot 10^{-4}$	K ⁻¹
Température de fusion	T_f	234	K
Capacité calorifique	C_p	140	J/kg K
Coefficient de variation de la tension superficielle	σ_T	$-2.0 \cdot 10^{-4}$	Nm/K
Tension superficielle	σ	0.498	Nm ⁻¹
Nombre de Prandtl	Pr	0.024	

Références bibliographiques

- Ablitzer 92 **D. Ablitzer, M. Allibert, Y. Fautrelle, Y. Honnorat, C. Ménné-trier, et al.**
Etude de la purification du titane par le procédé continu de refusion par bombardement électronique
Colloque "Matériaux : science et industrie", La Vilette, pp. 107-108, 1992
- Antoni 93 **B. Antoni, G. Bertrand, E. Le Guyadec, P. Lemaire, J. Maury, J. Ravoire**
Cerium evaporation from an EB source
Proc. sixth Int. Top. Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics (NURETH 6), Grenoble, pp 1471-1479, 1993
- Avare 92 **C. Avare, Y. Fautrelle, P. Gillon**
Numerical modelling of thermocapillary convection in electron beam melting
XIth International Conference on Vacuum Metallurgy, pp. 131-133, 1992
- Batchelor 67 **G. K. Batchelor**
An Introduction to Fluid Dynamics
Cambridge University Press
- Blay 92 **Dominique Blay**
Modélisation d'un problème de convection-diffusion par la méthode des volumes finis
Modélisation numérique en thermique (ateliers), Institut d'Etudes Scientifiques de Cargèse, 29 Juin-4 Juillet 1992
- Blumenfeld 94 **L. Blumenfeld, Soubbaramayer**
Combined effect of buoyancy and interfacial phenomena on the heat transfer coefficient at the melt surface of an EB evaporator
10th Int. Heat Transfer Conference, Brighton, 14-18 Aug., 1994
- Chan 88a **C.L. Chan, M.M. Chen, J. Mazumder**
Asymptotic solution for thermocapillary flow at high and low Prandtl numbers due to concentrated surface heating
Transactions of the ASME, 10, pp. 140-146, 1988
- Chan 88b **C. L. Chan, R. Zehr, J. Mazumder, M. M. Chen**
Three-dimensional model for convection in laser weld pool
Modeling of Casting and Welding Processes IV, pp. 229-246, 1988
- Correa 88 **S. M. Correa, R. E. Sundell**
A computational and experimental study of the fluid flow in weld pools
Modeling of Casting and Welding Processes IV, pp. 211-227, 1988

- Demirdzic 82 **I.A. Demirdzic**
A finite hod for computation of fluid flow in complex geometries
 Ph. D thesis, University of London, 1982
- Dewhurst 90 **S.C. Dewhurst, K.T. Stark**
Programmer en C++
 Manuels Informatiques Masson, ISBN 2-225-82192-5, 1990
- Fautrelle 91 **Y. Fautrelle, F. Schmidt**
Surface tension driven flows generated by a concentrated surface heating
 A paraître (Eur. J. of Mech. B)
- Gaskell 88 **P.H. Gaskell, A.K.C. Lau**
Curvature-compensated convective transport : SMART, a new boundedness-preserving transport algorithm
 Int. J. Num. Meth. in Fl., 8, pp. 617-641, 1988
- Hayase 92 **T. Hayase, J.A.C Humphrey, R. Greif**
A consistently formulated QUICK scheme for fast and stable convergence using finite-volume iterative calculation procedures
 Journal of computational physics, 98, pp 108-118, 1992
- Lam 81 **C.K.G. Lam, K. Bremhorst**
A modified form of the $k-\epsilon$ model for predicting wall turbulence
 Journal of fluid engineering, 103, pp. 456-459, 1981
- Lan 91 **C. W. Lan, Sindo Kou**
Thermocapillary flow and natural convection in a melt column with an unknown melt/solid interface
 Int. J. Num. Meth. Fl., 12, pp. 52-80, 1991
- Launder 72 **B.E. Launder, D.B. Spalding**
Mathematical models of turbulence
 Academic press, London, 1972
- Leonard 79 **B.P. Leonard**
A stable and accurate convective modelling procedure based on quadratic upstream interpolation
 Comp. Meth. Appl. Mech. Eng., 19, pp. 59-98, 1979
- Ostrach 82 **S. Ostrach**
Low-gravity fluid flows
 Ann. Rev. Fluid Mech., 14, pp 313-345, 1982
- Patankar 80 **S. V. Patankar**
Numerical heat transfer and fluid flow
 McGraw-Hill, New-York, 1980
- Paul 88 **A. Paul, T. DebRoy**
Prediction of Marangoni convection heat transfer and surface profiles during laser welding
 Modeling of Casting and Welding Processes IV, pp. 421-431, 1988

- Piquet 89 **J. Piquet, M. Visonneau**
Computation of flows past shiplike hulls
Vth International Conference on Numerical Ship Hydrodynamics
Hiroshima International conference Center, Sept. 25-28, 1989
- Press 92 **W.H Press, W.T. Vetterling et al**
Numerical recipes in C
The Art Of Scientific Computing, second edition, Cambridge University Press, ISBN 0-521-43108-5
- Pshenichnikov 83 **A. F. Pshenikchnikov, G. A. Tokmenina**
Deformation of the free surface of a liquid by thermocapillary motion
Translated from : Izv. Akad. Nauk. SSSR, Mekh. Zhidkosti i Gaza, 3, pp. 150-153, 1983
- Revel 93 **J-F. Revel**
Etude et amélioration d'un schéma de décentrage de type SMART
D.E.A "Equations aux dérivées partielles", Ecole Nationale Supérieure d'Informatique et Mathématiques Appliquées de Grenoble
- Rivas 91a **Damián Rivas**
High-Reynolds-Number thermocapillary flows in shallow enclosures
Phys. Fluids A, 3 (2), pp. 280-291, 1991
- Rivas 91b **Damián Rivas**
Viscous effects on the free surface deformation in thermocapillary flows
Phys. Fluids A, 3 (10), pp. 2466-2467, 1991
- Roux 90 **Agnès Roux, François Dominique Cipriani**
Laser surface treatment : Numerical simulation of thermocapillary flows
VIIIth International Symposium on Gas Flow and Chemical Lasers (Madrid), SPIE vol. 1397, pp. 693-696, 1990
- Roux 91 **A. Roux, F. D. Cipriani, P. Bontoux**
A numerical simulation of buoyancy thermocapillary driven convection in a floating zone model with rotation
Advanced Space Research, 11 (7),pp. 133-141, 1991
- Sanochkin 87 **Yu. V. Sanochkin, R. S. Tikhvatullin, S. S. Filippov**
Numerical modelling of thermocapillary convection in a fluid layer with local heating of the free surface
Translated from : Izv. Akad. Nauk. SSSR, Mekh. Zhidkosti i Gaza, 4, pp. 108-113, 1987
- Sanochkin 89 **Y.V. Sanochkin**
Thermocapillary convection associated with non uniform heating of the free surface of a liquid
Translated from : Izv. Akad. Nauk. SSSR, Mekh. Zhidkosti i Gaza, 1, pp. 136-142, 1989

- Schlichting 69 **H. Schlichting**
Boundary layer theory
 Mac Graw Hill, New-York, 1969
- Shyy 91a **W. Shyy, Y. Pang, G. B. Hunter**
Effect of turbulent heat transfert on continuous ingot solidification
 ASME Winter — Annual Meeting, 1991
- Shyy 91b **W. Shyy, Y. Pang, D. Y. Wei, M.-H. Chen**
Effects of surface tension and buoyancy on continuous ingot solidification
 AIAA paper #91-0506, 28th Aerospace Sciences Meeting, 1991
- Stroustrup 89 **Bjarne Stroustrup**
Le langage C++
 InterEditions, Addison-Wesley Europe, ISBN 2-7296-0294-1, 1989
- Szekely 88 **J. Szekely, G. M. Oreper, J. McKelliget**
Heat and fluid flow phenomena in arc welding operations
 Modeling of Casting and Welding Processes IV, pp. 247-276, 1988
- Tosello 93 **I. Tosello**
Etude des phénomènes de convection capillaire lors de la solidification dirigée de couches planes d'alliages Sn-Bi
 Thèse de doctorat INPG, 1993
- Tsai 88 **M. C. Tsai, S. Kou**
The advantages of orthogonal curvilinear coordinates in simulating Marangoni convection in deformed weld pools
 Modeling of Casting and Welding Processes IV, pp. 409-420, 1988
- Tsai 89 **M.C. Tsai, S. Kou**
Marangoni convection in weld pools with a free surface
 Int. Jour. For Num. Meth. in Fluids, 9, pp. 1503-1516, 1989
- Vanka 86 **S.P. Vanka**
Block implicit multigrid solution of Navier-Stokes equations in primitive variables
 Journal of computational physics, 65, pp 138-158, 1986
- Wesseling 91 **P. Wesseling**
An introduction to multigrid methods
 Pure & applied mathematics, Wiley-Interscience series, Wiley & Sons editors, ISBN 0-471-93083-0
- Zehr 88 **R. Zehr, M. M. Chen, J. Mazumder**
Generic structure of thermocapillary flow in weld pools and its influence on computational strategy
 Modeling of Casting and Welding Processes IV, pp. 433-446, 1988



**Thèse de Doctorat de l'Institut National
Polytechnique de Grenoble**

TITRE

**Etude et modélisation de l'effet thermocapillaire,
application à la refusion des métaux réfractaires.**

AUTEUR

AVARE Christophe

ETABLISSEMENT

Laboratoire EPM – MADYLAM

RÉSUMÉ

Les variations de la tension superficielle avec la température, ou effet Marangoni ou thermocapillaire, génèrent des écoulements qui peuvent être très importants, notamment dans les procédés de refusion par bombardement électronique des métaux réfractaires et superalliages. L'étude de ces écoulements lorsque le flux énergétique est important a été conduite à l'aide d'un modèle analytique permettant de caractériser les grandeurs principales (température et vitesse) au point d'impact et d'une étude paramétrique concernant la structure globale de l'écoulement. Les prédictions de ces modèles ont été vérifiées à l'aide de simulations numériques utilisant une formulation tensorielle généralisée des équations de Navier-Stokes et intégrées par la méthode des volumes finis adaptée aux maillages non orthogonaux. L'algorithme SCGS (Symmetric Coupled Gauss-Siedel) est préféré aux méthodes de type SIMPLE pour calculer la pression et vérifier la conservation de la masse. L'application de ce modèle aux écoulements laminaires obtenus avec du mercure et un faisceau de quelques watts met en évidence un contrôle du champ de température par les forces de convection thermogravitaire et du champ de vitesse par l'effet thermocapillaire. L'extension de cette étude au cas industriel de la fusion du titane (faisceau de 50 kW) nécessite la prise en compte de la turbulence par un modèle type k-epsilon et des pertes thermiques par rayonnement et évaporation. L'accent est mis sur l'évolution des débits d'évaporation en fonction de la densité de puissance et montre un phénomène de saturation qui est confirmé par l'expérience.

MOTS CLÉS

Effet Marangoni, Modélisation, Bombardement électronique, Turbulence, Evaporation, Surface libre